



**CÁLCULO DA CONDUTIVIDADE TÉRMICA EFETIVA DE MEIOS  
HETEROGÊNEOS COM MÚLTIPLAS ESCALAS VIA HOMOGENEIZAÇÃO  
REITERADA E ELEMENTOS FINITOS**

**Lucas Prado Mattos**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

**Orientador: Manuel Ernani de Carvalho Cruz**

**Rio de Janeiro  
Fevereiro de 2017**

CÁLCULO DA CONDUTIVIDADE TÉRMICA EFETIVA DE MEIOS  
HETEROGÊNEOS COM MÚLTIPLAS ESCALAS VIA HOMOGENEIZAÇÃO  
REITERADA E ELEMENTOS FINITOS

Lucas Prado Mattos

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO  
ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE  
ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO  
COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO  
GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA MECÂNICA.

Examinada por:

---

Prof. Manuel Ernani de Carvalho Cruz, Ph.D.

---

Prof. Carolina Palma Naveira Cotta, D. Sc.

---

Prof. Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho, D. Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

FEVEREIRO DE 2017

Mattos, Lucas Prado

Cálculo da Condutividade Térmica Efetiva de Meios Heterogêneos com Múltiplas Escalas via Homogeneização Reiterada e Elementos Finitos/ Lucas Prado Mattos. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2017.

XIII, 78 p.: il.; 29,7 cm.

Orientador: Manuel Ernani de Carvalho Cruz

Dissertação (mestrado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Mecânica, 2017.

Referências Bibliográficas: p. 76-81.

1. Condutividade térmica efetiva. 2. Elementos finitos. 3. Homogeneização reiterada. 4. Meios heterogêneos com múltiplas escalas. I. Cruz, Manuel Ernani de Carvalho. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Mecânica. III. Título.

*"We but mirror the world. All the tendencies present in the outer world are to be found in the world of our body."*

(Ghandi)

*"There is no difference in what we're doing in here that doesn't show up as bigger symptoms out there."*

(Alanis Morissette)

*"The micro is the macro."*

(Autor desconhecido)

## AGRADECIMENTOS

Agradeço ao professor Manuel Ernani de Carvalho Cruz, orientador e principal idealizador deste trabalho, por toda a atenção e pela excelente orientação ao longo do desenvolvimento desta dissertação e de todo o mestrado. Agradeço ainda ao Carlos Frederico Trotta Matt, ao Leandro Bastos Machado e ao Eduardo Nascimento que em algum momento realizaram trabalhos nesta mesma linha de pesquisa.

Agradeço a todos os professores do curso da COPPE/UFRJ que ao longo dos últimos anos me transformaram em mestre. Agradeço especialmente ao professor Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho e à professora Carolina Palma Naveira Cotta por aceitarem o convite para participar da minha banca.

Agradeço à CAPES e à FAPERJ pelo apoio financeiro ao longo deste trabalho. Agradeço ao professor Albino José Kalab Leiroz e à Vera Lúcia P. S. Noronha pela ajuda para cumprir requisitos burocráticos e pelo auxílio em momentos de incertezas. Agradeço a todos os amigos que eu fiz ao longo do mestrado, à Ana Cláudia Rodrigues Silva, ao Rafael Cardoso Brandão, ao Daniel Rodrigues e ao Bernardo Feijó Junqueira. Agradeço também à Helena Carvalho Mendes, minha amiga na graduação, no mestrado e em toda a vida; à Paloma Carolina Carvalho Pereira e à Luana Priscila Carvalho Pereira, cuja presença muitas vezes foi fundamental para que eu conseguisse me equilibrar em tempos tão confusos; ao Thiago de Souza Madeira pelo apoio e à Renata Coura Arruda por revisar meus textos e pelas dicas salvadoras.

E finalmente expresso minha profunda gratidão às pessoas a quem eu devo este trabalho, este mestrado, tudo o que veio antes e tudo o que virá depois: minha mãe Nilza Prado de Aguiar Mattos e meu pai Jayme de Aguiar Mattos. Eu amo e admiro muito vocês. Sem o apoio e o exemplo que vocês me deram durante toda a minha vida nada disso seria possível.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

CÁLCULO DA CONDUTIVIDADE TÉRMICA EFETIVA DE MEIOS  
HETEROGÊNEOS COM MÚLTIPLAS ESCALAS VIA HOMOGENEIZAÇÃO  
REITERADA E ELEMENTOS FINITOS

Lucas Prado Mattos

Fevereiro/2017

Orientador: Manuel Ernani de Carvalho Cruz

Programa: Engenharia Mecânica

A transferência de calor em um material heterogêneo pode ser modelada por conjuntos de equações diferenciais parciais em um nível microscópico onde não existam heterogeneidades. Por isso, o estudo numérico direto de tais equações em um meio altamente heterogêneo e com múltiplas escalas pode ser muito custoso ou até mesmo impossível de ser realizado. Em nosso caso de maior interesse, materiais com múltiplas escalas, podemos ter pequenas partículas (da menor dimensão) dispersas em um corpo (da maior dimensão) e ainda formando agregados de dimensão intermediária. A simulação da transferência de calor nesse meio requereria malhas extremamente finas e mal condicionadas que tornariam essencialmente impossível o êxito de qualquer implementação computacional. Por isso, propomos o cálculo da condutividade térmica efetiva de meios heterogêneos com múltiplas escalas. Ao longo deste trabalho, desenvolvemos uma metodologia analítico-numérica baseada no cálculo variacional, na teoria da homogeneização reiterada e no método dos elementos finitos para determinar a condutividade térmica efetiva de materiais compósitos constituídos por duas fases, ambas homogêneas, isotrópicas e com contato térmico perfeito entre si. Essa metodologia é então aplicada a casos que possuem solução analítica para que seja validada e, em seguida, a geometrias mais complexas. Os resultados obtidos indicam que esta metodologia desenvolvida pode contribuir para a explicação do aumento da condutividade térmica efetiva observada em algumas classes de meios heterogêneos.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

CALCULATION OF THE EFFECTIVE THERMAL CONDUCTIVITY OF  
MULTISCALE HETEROGENEOUS MEDIA BASED ON REITERATED  
HOMOGENIZATION THEORY AND THE FINITE ELEMENT METHOD

Lucas Prado Mattos

February/2017

Advisor: Manuel Ernani de Carvalho Cruz

Department: Mechanical Engineering

Heat transfer through heterogeneous materials may be modeled using sets of partial differential equations in a microscopic level where there is no heterogeneity. For this reason, the direct numerical study of such equations inside a highly heterogeneous material and with multiple scales can become outstandingly difficult or even impossible to solve. In the case of present interest, materials with multiple scales, one can have small particles at the smallest dimension, scattered throughout a body with the largest dimension, while forming aggregates at the intermediate dimension. The simulation of heat transfer inside this material would require extremely fine and ill-conditioned meshes and, therefore, the success of a numerical implementation becomes extremely unlikely. This is the reason why one proposes to calculate an effective thermal conductivity of a heterogeneous medium with multiple scales. In the present work, a numerical-analytical methodology is developed, based on the variational calculus, the theory of reiterated homogenization and the finite element method, to computationally determine the effective thermal conductivity of composite materials with two homogeneous and isotropic phases, with perfect thermal contact between them. The methodology is then applied to cases with analytical solutions to validate the implementation. Next, geometries that are more complex are considered. The obtained results show that the developed methodology can aid in the explanation of the effective thermal conductivity gain experimentally observed with some classes of heterogeneous media.

## SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	1
1.1 A homogeneização convencional.....	1
1.2 A condutividade térmica efetiva.....	4
1.3 A homogeneização reiterada .....	4
1.4 Objetivos do trabalho .....	6
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	8
3 FORMULAÇÃO .....	13
3.1 A condução de calor .....	13
3.2 A condução de calor em compósitos .....	14
3.3 Homogeneização convencional .....	17
3.3.1 Expansões Assintóticas.....	17
3.3.2 A Condição de Solução .....	19
3.4 Homogeneização Reiterada .....	23
3.4.1 Expansões Assintóticas.....	24
3.4.2 Primeiro Problema Local ou Primeiro Problema de Célula. ....	32
3.4.3 Segundo Problema Local ou Segundo Problema de Célula. ....	33
3.5 Relação Entre as Frações de Volume .....	33
4 SOLUÇÃO NUMÉRICA .....	36
4.1 Forma fraca do problema de condução de calor em um meio heterogêneo com múltiplas escalas.....	36
4.1.1 Forma fraca do primeiro problema local .....	37
4.1.2 Forma fraca do segundo problema local.....	38
4.2 Elementos finitos na solução de um problema modelo .....	39
4.2.1 Problema modelo a ser solucionado .....	39
4.2.2 O método dos elementos finitos .....	40
4.3 Método dos Gradientes Conjugados.....	42



4.4 Métodos Para Calcular a Condutividade Térmica Efetiva .....	45
4.4.1 Método da Quadratura Analítica .....	45
4.4.2 Método da Norma de Energia.....	46
4.4.3 Método da Quadratura de Gauss .....	47
4.5 Algoritmo de cálculo .....	47
5 VALIDAÇÃO E RESULTADOS .....	50
5.1 Validação .....	50
5.1.1 Compósitos Bilaminados .....	51
5.1.2 Arranjo quadrado de cilindros circulares .....	56
5.1.3 Comparação para a condutividade térmica de cruzeta e círculo com mesmo $\phi$ e mesmo $\sigma$ .....	61
5.2 Resultados – uma análise do ganho da condutividade térmica em função da distribuição de material nos níveis microscópicos .....	63
5.2.1 O ganho de condutividade térmica .....	63
5.2.2 Arranjo quadrado de cilindros circulares nos níveis microscópicos Z e Y.....	65
5.2.3 Arranjo quadrado de cruzetas nos níveis microscópicos Z e Y.....	67
5.2.4 Arranjo quadrado de cilindros circulares no nível microscópico Z e arranjo quadrado de cruzetas no nível microscópico Y.....	69
5.2.5 Arranjo quadrado de cruzetas no nível microscópico Z e arranjo quadrado de cilindros no nível microscópico Y .....	71
6 CONCLUSÃO.....	74
7 REFERÊNCIAS .....	76
APÊNDICE A – ELEMENTOS FINITOS TRIANGULARES LINEARES .....	82
APÊNDICE B – INTEGRAÇÃO DE GAUSS .....	85

## LISTA DE SÍMBOLOS

$a_1$	Operador diferencial parcial definido em (3.80)
$a(.,.)$	Operador simétrico positivo-definido
$A^\varepsilon$	Operador diferencial parcial genérico com coeficientes contínuos que variam periodicamente
$A^H$	Operador diferencial parcial genérico com coeficientes homogeneizados
$A_i$	Componentes da expansão assintótica de $A^\varepsilon$ . $i=0,1,2,3...$
$A_{el}^i$	Área do $i$ -ésimo elemento
$C_0$	Coeficiente efetivo de $A^\varepsilon$
$C_{eff\,i,j}$	Coeficiente efetivo de $A^\varepsilon$
$\mathbf{d}$	Vetor de direção da busca no método dos gradientes conjugados
$f$	Termo fonte
$f_c$	Termo fonte do Problema de Valor de Contorno do tipo 3
$F$	Função genérica
$g$	Taxa de geração de calor
$g_c$	Taxa de geração de calor no componente contínuo
$g_d$	Taxa de geração de calor no componente descontínuo
$h$	Espaçamento da malha
$H$	Generalização do domínio da microescala, da escala intermediária e da macroescala para o problema modelo
$k$	Condutividade térmica isotrópica. Em algumas equações, mais generalizadas, aparece com os índices $i$ e $j$ , $k_{i,j}$
$k_c$	Condutividade térmica do material contínuo
$k_d$	Condutividade térmica do material disperso
$k_\varepsilon$	Condutividade térmica isotrópica no P. V. C.-1
$k_H$	Generalização da condutividade térmica efetiva encontrada após a solução do problema de célula para o problema modelo
$k_{eff}$	Condutividade térmica efetiva calculada através da homogeneização convencional
$k_{i,j}^1$	Condutividade térmica efetiva do primeiro problema de célula
$\hat{k}_x^{Analítico}$	Condutividade térmica efetiva calculada usando fórmulas analíticas disponíveis na literatura

$\hat{k}_x^{QA/NE/QG}$	Condutividade térmica efetiva calculada usando um dos seguintes métodos numéricos: quadratura analítica (QA), método da norma de energia (NE) ou quadratura de Gauss (QG)
$\hat{k}_{i,j}$	Condutividade térmica efetiva do segundo problema de célula. É a condutividade térmica efetiva do meio analisado. O subscrito indica a direção na qual está sendo calculada, se for um caso particular
$K$	Operador diferencial parcial definido em (3.7)
$K^\varepsilon$	Operador diferencial parcial, explicitado que é um P. V. C.-1
$K^H$	Operador diferencial parcial homogeneizado
$k_{eff}$	Condutividade térmica efetiva calculada através da homogeneização convencional
$L$	Comprimento característico da macroescala
$L^i$	Operador diferencial parcial definido para melhor apresentar o resultado da homogeneização reiterada. $i=1,2,3,4,5$ .
$n$	Número de dimensões consideradas no domínio
$nel$	Número de elementos no qual o domínio é dividido
$ng$	Número de nós globais na malha
$\mathbf{n}$	Vetor normal apontando para fora da fronteira do domínio
$N$	Funções de forma dos elementos finitos triangulares
$P_1(\Omega_{sc}^i)$	Espaço de todos os polinômios de grau 1 definidos sobre o elemento triangular $\Omega_{sc}^i$
$\mathbf{q}$	Fluxo de calor
$\mathbf{Q}$	Vetor intermediário usado no método dos gradientes conjugados
$r_i$	Coordenada do ponto $i$ na quadratura de Gauss
$s_i$	Coordenada do ponto $i$ na quadratura de Gauss
$T$	Campo de temperatura
$T_\varepsilon$	Campo de temperatura do P. V. C.-1
$T_c$	Campo de temperatura no componente contínuo
$T_d$	Campo de temperatura no componente descontínuo
$T_i$	Componentes da expansão assintótica de $T^\varepsilon$ . $i=0,1,2,3...$
$u$	Genericamente, é uma quantidade a ser conservada
$u_i$	Componentes da expansão assintótica de $u^\varepsilon$ . $i=0,1,2,3...$
$u_\varepsilon$	Variável do Problema de Valor de Contorno do tipo 1

$u_H$	Variável do Problema de Valor de Contorno do tipo 2
$u_C$	Variável do Problema de Valor de Contorno do tipo 3
$v$	Escalar usado no método dos gradientes conjugados
$v_i$	Componentes da expansão assintótica de $v^\varepsilon$ . $i=0,1,2,3...$
$\mathbf{x}$	Sistema de coordenadas da macroescala
$\mathbf{y}$	Sistema de coordenadas da escala intermediária
$\mathbf{z}$	Sistema de coordenadas da microescala
$X$	Domínio da macroescala
$Y$	Domínio da escala intermediária
$Z$	Domínio da microescala
$w_i$	Peso na quadratura de Gauss

### Letras Gregas

$\alpha$	Generalização da condutividade térmica dos materiais para o problema modelo
$\delta$	Norma do vetor dos resíduos no método dos gradientes conjugados
$\Delta_x^{QA/NE/QG}$	Desvio em relação ao resultado analítico do resultado numérico calculado por quadratura analítica (QA), método da norma de energia (NE) ou quadratura de Gauss (QG)
$\epsilon$	Tolerância do método dos gradientes conjugados
$\varepsilon$	Razão entre dois comprimentos característicos consecutivos
$\lambda$	Comprimento característico da primeira escala menor que a macroescala
$\mu$	Escalar usado no método dos gradientes conjugados
$\xi$	Comprimento característico da segunda escala menor que a macroescala
$\sigma$	Contraste, razão entre a condutividade térmica do material descontínuo e do material contínuo
$\phi$	Razão entre a área ocupada pelo material descontínuo e a área total
$\phi_Z^{max}$	Fração de material na escala $Z$ para a qual o ganho de condutividade térmica é máximo para determinado $\phi$
$\chi_y^p$	Família de funções solução do primeiro problema de célula
$\chi_p$	Família de funções solução do segundo problema de célula na

homogeneização reiterada, e do único problema de célula da homogeneização convencional

$\psi$	Generalização das famílias de funções $\chi_p$ para o problema modelo
$\Omega$	Domínio de um meio multiescalar
$\Omega_e$	Elemento triangular genérico
$\Omega_c$	Região ocupada pelo material contínuo
$\Omega_d$	Região ocupada pelo material descontínuo
$\Omega$	Domínio de um meio multiescalar
$\Omega_{sc}$	Domínio de uma célula periódica
$\Omega_{sc}^i$	$i$ -ésimo elemento triangular da malha
$\Omega_{sc,Z}$	Domínio de uma célula periódica em $Z$
$\partial\Omega$	Superfície limitante de $\Omega$

## 1 INTRODUÇÃO

Nesta seção, começamos a apresentar conceitos e ferramentas que serão importantes ao longo do desenvolvimento deste trabalho. Com isso, poderemos apresentar os objetivos deste trabalho e quais serão os casos analisados.

### 1.1 A homogeneização convencional

Na engenharia, comumente são utilizados materiais heterogêneos, compostos de matriz com inclusões - que podem ser fibras ou partículas. Estas inclusões são classificadas por sua fração de comprimento, área ou volume (dependendo do número de dimensões consideradas); distribuição de tamanho (mono ou polidisperso); distribuição de forma e distribuição espacial (ordenada – figura 1.1-a – ou randômica – figura 1.1-b).

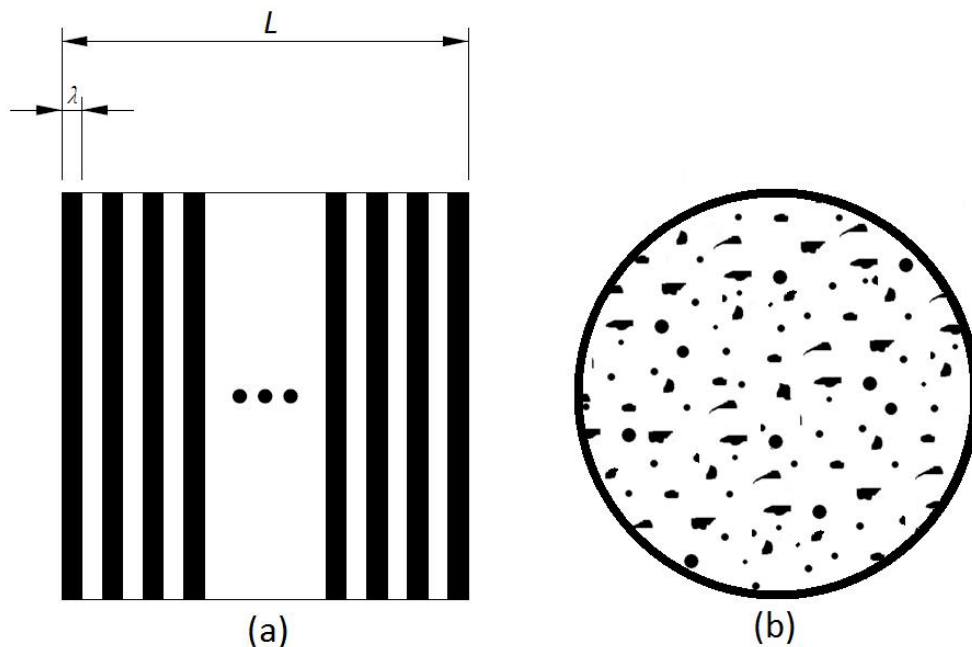


Figura 1.1 - As heterogeneidades podem estar presentes de maneira periódica (figura 1.1-a) como em materiais compósitos bilaminados, por exemplo, ou de maneira randômica (figura 1.1-b). Figura adaptada de (MATT, 2003).

Para meios ordenados, os comprimentos característicos do domínio,  $\Omega$ , e dos períodos são, respectivamente,  $L$  e  $\lambda$ . O parâmetro positivo  $\varepsilon$  é a razão de tais escalas,

$$\varepsilon \equiv \frac{\lambda}{L} \ll 1. \quad (1.1)$$

Nesses materiais, fenômenos físicos como a transferência de calor podem ser modelados por conjuntos de E.D.P.s - Equações Diferenciais Parciais – em um nível microscópico onde não há heterogeneidade. Com isso, a computação numérica direta do campo de temperatura pode ser muito custosa ou até mesmo impossível de ser realizada. Assim, é preferível analisar mais profundamente os modelos microscópicos disponíveis e deduzir, através de algum processo de média, leis *homogeneizadas* macroscópicas adequadas. Esse é exatamente o propósito da teoria matemática da homogeneização: extrair propriedades relevantes ou comportamentos físicos intrinsecamente macroscópicos a partir de propriedades microscópicas.

A homogeneização se utiliza de médias volumétricas para formular um modelo de mistura matematicamente rigoroso para um meio multicomponente de microestrutura periódica. Ela é uma maneira rigorosa de calcular a média, ou seja, ela extrai parâmetros efetivos de meios heterogêneos. Fisicamente, homogeneização é um procedimento de *upscale* que revela o comportamento macroscópico de um meio contínuo a partir de uma consideração dos primeiros princípios da escala menor (RODRÍGUEZ *et al.*, 2015).

Matematicamente, para definirmos a homogeneização, devemos introduzir três tipos de Problemas de Valor de Contorno (P. V. C.):

a) P. V. C.-1

$$A^\varepsilon u_\varepsilon = f \quad \text{em } \Omega, \quad (1.2)$$

$$u_\varepsilon \text{ sujeito às condições de contorno apropriadas.} \quad (1.3)$$

O domínio  $\Omega$  é um conjunto aberto e limitado de  $R^n$ ,  $\partial\Omega$  é a superfície limitante de  $\Omega$  em  $R^{n-1}$ ,  $A^\varepsilon$  é um operador diferencial parcial genérico com coeficientes contínuos que variam periodicamente,  $f: \Omega \rightarrow R^m, m \leq n$ , é o termo fonte e  $u_\varepsilon$  está

sujeita a condições de contorno de Dirichlet, de Neumann ou uma mistura dessas. É dito que o P. V. C.-1 tem coeficientes que oscilam rapidamente.

b) P. V. C.-2

$$A^H u_H = f \quad \text{em } \Omega, \quad (1.4)$$

$$u_H \text{ sujeito às condições de contorno apropriadas.} \quad (1.5)$$

O operador diferencial parcial  $A^H$  tem *coeficientes constantes*, ou seja,  $A^H$  é um operador homogêneo. As condições de contorno aplicadas a  $u_H$  em (1.5) são as mesmas aplicadas a  $u_\epsilon$  em (1.3). É dito que esse P. V. C. é homogeneizado.

c) P. V. C.-3

$$A^c u_c = f^c \quad \text{em } \Omega^c, \quad (1.6)$$

$$u_c \text{ sujeito às condições de contorno em } \partial\Omega^c. \quad (1.7)$$

O domínio  $\Omega^c$ , um conjunto limitado e aberto em  $R^n$ , é uma célula periódica de tamanho característico  $\lambda$ , ou seja, com dimensões proporcionais a  $\lambda$  em todas as  $n$  direções coordenadas. O operador diferencial parcial  $A^c$  pode ter coeficientes constantes ou variáveis dentro de  $\Omega^c$ .  $u_c$  e  $f^c$  são funções  $\lambda$ -periódicas (funções que admitem período  $C_j \lambda$ ,  $C_j \in R$  na direção  $x_j$ ,  $j=1, 2, \dots, n$ ). Este P. V. C. é chamado de problema de célula.

Podemos agora definir a homogeneização do ponto de vista matemático. O método é uma técnica matemática rigorosa através da qual se substitui, no limite em que  $\epsilon \rightarrow 0$ , um P. V. C. com coeficientes variando rapidamente (tipo 1) por um problema homogeneizado (P. V. C.-2), cujos coeficientes devem ser determinados resolvendo um problema de célula (P. V. C.-3). Embora os três problemas sejam, em geral, difíceis de serem resolvidos analiticamente, o método da homogeneização tem a vantagem que o P. V. C.-2 e o P. V. C.-3 são muito mais fáceis de serem resolvidos numericamente do que os de tipo P. V. C.-1 (CRUZ, 1997).



## 1.2 A condutividade térmica efetiva

Consideramos aqui que a  $k_{eff}$  – condutividade térmica efetiva – de um material compósito é função basicamente de três parâmetros,

a) contraste ( $\sigma$ ), a razão entre a condutividade térmica da partícula dispersa,  $k_d$ , e a condutividade térmica da matriz contínua,  $k_c$ ,

$$\sigma \equiv \frac{k_d}{k_c}, \quad (1.8)$$

b)  $\phi$ , a razão entre a área ocupada pelas partículas ( $\Omega_d$ ) e a área total do meio ( $\Omega$ ),

$$\phi \equiv \frac{\Omega_d}{\Omega}. \quad (1.9)$$

c)  $G$ , a geometria da microestrutura.

## 1.3 A homogeneização reiterada

E se existir mais de um nível microscópico? Em muitas aplicações recentes de engenharia, tem-se tornado importante saber o comportamento macroscópico de estruturas heterogêneas que exibem diversos níveis microscópicos diferentes (figura 1.2). Homogeneização reiterada é a técnica matemática usada para obter coeficientes efetivos para esse tipo de meio complexo. Agora, o compósito é periódico em duas escalas (ou, eventualmente, até em mais),

$$\varepsilon = \frac{\lambda}{L} \quad (1.10)$$

e

$$\varepsilon = \frac{\xi}{\lambda}. \quad (1.11)$$

onde  $L$ ,  $\lambda$  e  $\xi$  representam o comprimento característico da macroescala, da escala intermediária e da microescala, respectivamente. O fator  $\varepsilon$  também faz a correspondência entre o sistema de coordenadas de diferentes escalas,

$$\mathbf{y} \equiv \frac{\mathbf{x}}{\varepsilon} \quad (1.12)$$

e

$$\mathbf{z} \equiv \frac{\mathbf{y}}{\varepsilon} = \frac{\mathbf{x}}{\varepsilon^2}. \quad (1.13)$$

O valor de  $\varepsilon$  corresponde à razão entre ordens de grandeza, e tende a zero. Os resultados obtidos em (AURIAULT *et al.*, 2009) indicam que a formulação desenvolvida ao longo deste trabalho nos fornece bons resultados até para valores de  $\varepsilon$  da ordem de  $10^{-1}$ .

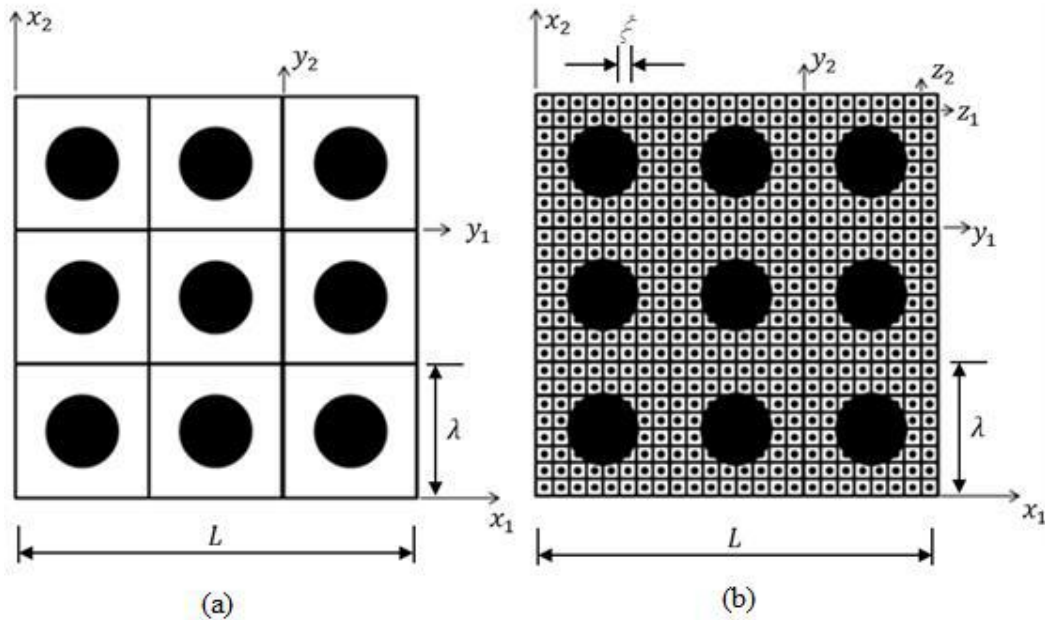


Figura 1.2 Duas células, a da esquerda com um nível microscópico e a da direita com dois níveis microscópicos diferentes. Nesta figura, e em todas as representações de arranjos geométricos dos níveis microscópicos neste trabalho, os níveis microscópicos são exibidos em tamanho muito maior do que seus tamanhos reais. Se os desenhos fossem feitos em escala real, como  $\xi \ll \lambda \ll L$ , a geometria da microescala não seria visível.

#### 1.4 Objetivos do trabalho

Usando homogeneização simples, ou seja, com apenas um nível microestrutural, é possível chegar a uma solução para a condutividade térmica efetiva do arranjo ordenado quadrado de cilindros (Figura 1.2-a). Já usando a homogeneização reiterada, é possível chegar à condutividade térmica efetiva de arranjos cuja geometria possua mais de um nível microestrutural (Figura 1.2-b). Desejamos descobrir como essas condutividades térmicas se comparam, já que ambos os arranjos apresentam o mesmo contraste  $\sigma$  e a mesma razão entre as áreas  $\phi$ .

A partir deste momento, utilizaremos o código implementado em MATLAB® para calcular a condutividade térmica efetiva de meios heterogêneos com múltiplas escalas que apresentam outros arranjos microestruturais. A principal contribuição deste trabalho é justamente usar a homogeneização reiterada para realizar o cálculo dessas propriedades efetivas. Resultados que, no melhor do meu conhecimento, são inéditos.

Neste trabalho, serão considerados meios com microestruturas ordenadas e contato térmico perfeito entre as fases. Os arranjos estudados estão ilustrados na figura 1.3.

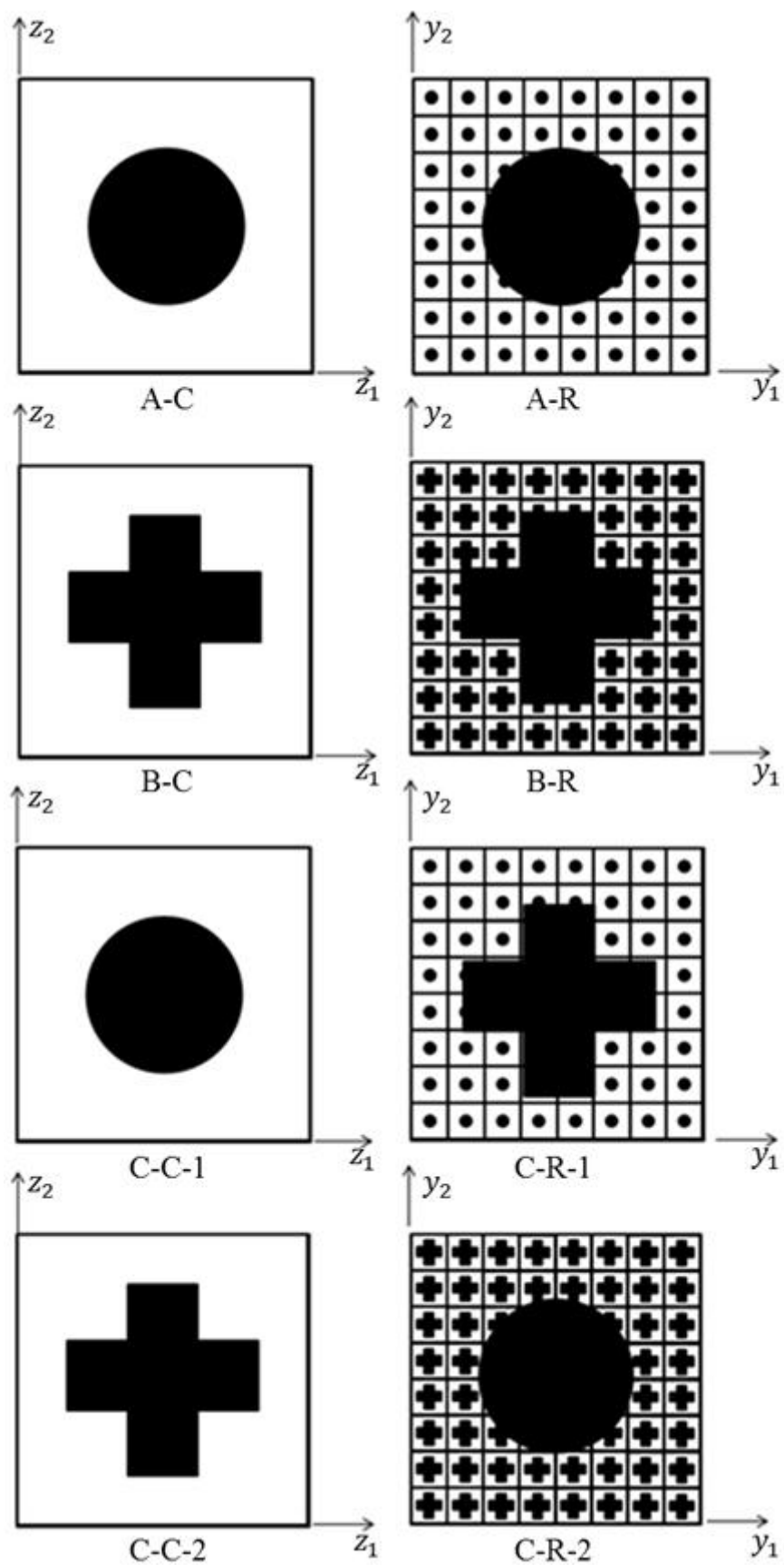


Figura 1.3 Arranjos analisados neste trabalho.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O cálculo de propriedades efetivas é realizado em diversas áreas. Além da condutividade térmica efetiva, ao longo dos últimos séculos foram publicados trabalhos que pesquisavam maneiras de calcular a condutividade elétrica efetiva (Nilsson, et al., 2016), a permissividade magnética efetiva (LÓPEZ et al., 2013), o módulo de elasticidade efetivo (GU e HE, 2017) etc.

Esse tipo de estudo teve início com os trabalhos de MAXWELL (1873) e de LORDE RAYLEIGH (1892). Desde então, a determinação de propriedades efetivas de materiais compósitos constituídos por partículas de um material suspensas randômica e estaticamente em uma matriz de outro material tem sido objeto de inúmeras investigações teóricas, experimentais e computacionais.

Existem dois tipos de informações fundamentais que determinam as propriedades de um material compósito: as propriedades físicas das fases (suas relações constitutivas) e sua microestrutura, caracterizada por sua dimensão, pela geometria das fases e pela distribuição espacial dos componentes. De um modo geral, em estudos analíticos ou computacionais, a microestrutura dos materiais compósitos é prescrita e de geometria relativamente simples, com uma partícula, ou fibra, no interior da matriz. Como é difícil ter controle rigoroso sobre a microestrutura, e isso é imprescindível para uma comparação válida, a comparação entre resultados teóricos e computacionais com dados experimentais permanece uma tarefa não trivial.

O artigo de Lorde Rayleigh publicado em 1892 e citado no início desta revisão bibliográfica é considerado seminal. Nele, o autor faz considerações sobre a condutividade elétrica, o índice de refração e a densidade relativa de um meio compósito que consiste em tubos sólidos em um arranjo quadrado ou esferas sólidas em um arranjo cúbico. Existem analogias matemáticas entre os fenômenos da condutividade elétrica e da condução de calor perpendiculares a um arranjo de tubos (bem como existem fenômenos análogos na área de óptica, biologia, vibração e matemática). Assim, (PERRINS *et al.*, 1979) e, posteriormente, (MANTEUFEL e TODREAS, 1994) fizeram uma generalização e uma expansão do trabalho de Rayleigh e obtiveram um conjunto de fórmulas analíticas para a condutividade térmica efetiva de um arranjo quadrado ou hexagonal de tubos paralelos. Na seção 5.1.2, Os resultados

para condutividades térmicas efetivas obtidas por Manteufel e Todreas, que são mais abrangentes que os de Perrins, serão utilizados para validar o código desenvolvido neste trabalho.

Além das metodologias analíticas, aplicadas pelos autores citados até aqui, outras abordagens podem ser usadas para estudar a condução de calor em materiais heterogêneos. Diante da falta de informações detalhadas sobre a microestrutura de meios heterogêneos reais, métodos estatísticos de determinação de limites para as propriedades efetivas procuram determinar fronteiras superiores e inferiores para o valor da propriedade efetiva, requerendo pouca ou nenhuma informação sobre a microestrutura. Essas funções de correlação obtidas têm importância prática significativa para microestruturas complexas (TORQUATO, 1991).

Propriedades médias (ou efetivas) de materiais compósitos podem ser determinadas por experimentos, ao invés de cálculos. Os trabalhos experimentais podem contribuir significativamente para o aperfeiçoamento dos modelos teóricos (MIRMIRA, 1999), além de serem importantes devido ao fato da caracterização da microestrutura dos materiais compósitos não ser uma tarefa fácil. Por exemplo, a teoria de aplicar a média em processos ocorrendo em meios randômicos (figura 1.1-b) ainda precisa ser aprimorada matematicamente. Assim, devido à complexidade do trabalho, é comum utilizar abordagens fenomenológicas para resolver o problema, como feito em (DUNN *et al.*, 1993), (JIN e LEE, 2013) e (VATANI *et al.*, 2015). Existem ainda trabalhos que propõem resolver o problema através de cálculos numéricos, como (MACHADO, 2000), (MATT e CRUZ, 2008) e (FAN e WANG, 2010). Esta dissertação está inserida neste último grupo.

Matematicamente, é dito que a transferência de calor em compósitos é descrita por equações diferenciais parciais com coeficientes que variam rapidamente. Em (BAKHVALOV e PANASENKO, 1989), os autores usam métodos assintóticos para investigar soluções para essas equações e demonstrações obtidas por eles serão usadas neste trabalho.

Para calcular a condutividade térmica efetiva, usaremos o método matemático da homogeneização. Esse método foi formulado por (BENSOUSSAN *et al.*, 1978), e um bom tratamento é dado em (AURIAULT, 1983). A homogeneização convencional é muito utilizada em problemas de diversas áreas, inclusive térmicos, não só na formulação, mas também no cálculo da condutividade térmica efetiva. Por exemplo, em (ZHOU *et al.*, 2012) os autores aplicam técnicas de homogeneização convencional para

calcular a condutividade térmica efetiva e a capacidade térmica volumétrica efetiva; em (KLUSEMANN *et al.*, 2012) os autores comparam métodos de homogeneização usados para avaliar a elasticidade em compósitos; em (NEZAMABADI, *et al.*, 2015) os autores aplicam a técnica para modelar a falha por compressão em compósitos, já que uma análise com múltiplas escalas é adequada para modelar tanto fissuras ocorrendo no nível da fibra quanto em nível macroscópico; em (BOUTAHAR *et al.*, 2016) é analisada a influência da porosidade na vibração de um disco rotativo, entre outros diversos exemplos disponíveis na literatura.

Já a homogeneização reiterada, apesar de ter sido formulada em 1978, é mais usada em formulação de problemas (ALLAIRE e BRIANE, 1996), porém não para o cálculo da condutividade térmica efetiva. Estudos que aplicam a homogeneização reiterada estão concentrados em outras áreas que não a condução de calor, como lubrificação (ALMQVIST *et al.*, 2008), elasticidade (CAO, 2005) ou porosidade (SHI *et al.*, 2005). Esta é a principal contribuição deste trabalho: usar homogeneização reiterada para o cálculo de propriedades efetivas na área de condução de calor.

O tradicional método matemático da homogeneização também já foi usado para o desenvolvimento de fórmulas que descrevam o fenômeno da condução de calor em meios compósitos com (AURIAULT e ENE, 1994) ou sem (AURIAULT, 1983) resistência térmica entre as fases. Em (MATINE *et al.*, 2015), os autores usam a homogeneização no tempo e no espaço usando uma expansão assintótica de múltiplas escalas para desenvolver um modelo para o problema da condução de calor transiente em um meio periódico heterogêneo. Já a forma fraca da homogeneização reiterada foi apresentada em (CRUZ e CASTILLERO, 2016), e esta é fundamental para podermos resolver o problema computacionalmente, através do método dos elementos finitos.

O método de homogeneização nos leva a ter que solucionar problemas de célula que, finalmente, nos levarão aos resultados desejados. Esses problemas podem ser resolvidos por superposição de soluções fundamentais, por diferenças finitas, por elementos finitos ou ainda por volumes finitos. Este último é o caso de (FAN e WANG, 2010), cujos resultados usaremos na seção 5.1.3 para validar os resultados obtidos para a microestrutura em formato de cruzeta.

A discretização pelo método dos elementos finitos possui duas grandes vantagens: a primeira é sua grande flexibilidade geométrica, que permite a modelagem de diversas geometrias de fases. A segunda vantagem é a ótima compatibilização com métodos variacionais, o que simplifica a implementação das condições de contorno e

dos modelos matemáticos (MACHADO, 2000). O método dos elementos finitos já foi utilizado para resolver diversos problemas de homogeneização na literatura. Por exemplo, em (WIMMER *et al.*, 2016), os autores usam homogeneização para avaliar propriedades efetivas em um modelo de asfalto; em (LI *et al.*, 2015), os autores propõem um novo método para aplicar elementos finitos na homogeneização de materiais incompressíveis; em (PAHLAVANPOUR *et al.*, 2013), os autores validam modelos analíticos das propriedades elásticas de nanocompósitos formados de polímeros e argila usando métodos de homogeneização e de modelagem com elementos finitos tridimensionais. Uma abordagem fundamental do método dos elementos finitos foi feita por (HUGHES, 1987) e por (BATHE, 1996). O gerador de malhas utilizado (oficialmente, via licença acadêmica) é o NETGEN (SCHÖBERL, 1997).

Muitos materiais usados hoje na engenharia possuem geometria heterogênea com diversos níveis microestruturais, especialmente os nanomateriais. A metodologia desenvolvida e aplicada neste trabalho pode ajudar a explicar o comportamento da condutividade térmica efetiva nesse grupo de materiais, apesar das hipóteses simplificadoras adotadas, por exemplo que relações constitutivas consideradas neste trabalho, como a Lei de Fourier, são válidas em todas as escalas consideradas.

Entender o comportamento macroscópico de materiais heterogêneos devido a seus diversos níveis microscópicos ainda é um desafio em aplicações recentes da transferência de calor, especialmente na área de nanocompósitos (EVANS *et al.*, 2008). Nanofluidos têm se tornado bastante atrativos nos últimos anos por seu enorme potencial para aumentar a eficiência da transferência de calor em fluidos. Em (DAS e CHOI, 2009), os autores fazem uma revisão das técnicas disponíveis para medir a condutividade térmica de nanofluidos. Experimentos recentes têm mostrado propriedades térmicas promissoras para os nanofluidos, chegando a dobrar a condutividade térmica do fluido base (PETERSON e LI, 2006). Existe ainda uma falta de compreensão dos resultados experimentais na literatura no que diz respeito ao papel do tamanho das partículas ou da fração de volume no aumento da condutividade térmica de nanofluidos (LI e PETERSON, 2007; CHOPKAR *et al.*, 2008; entre outros). No entanto, estudos experimentais apontam que o fato das nanopartículas se agregarem exerce um papel significativo no transporte térmico. Em (HONG *et al.*, 2006), os autores concluem que em nanofluidos com partículas de ferro a condutividade térmica aumenta não-linearmente à medida que as nanopartículas de ferro se agregam em *clusters*. Além disso, se demonstra (PUTMAN *et al.*, 2006; ZHANG *et al.*, 2006;



VENERUS *et al.*, 2006) que, em nanofluidos com partículas bem dispersas, não há aumentos excepcionais da condutividade térmica, e o aumento observado pode ser previsto de maneira correta por fórmulas já existentes.

### 3 FORMULAÇÃO

Começamos agora a analisar a formulação matemática do problema abordado. Iniciamos pela análise matemática da condução de calor em um caso geral e, em seguida, faremos considerações sobre o caso em que um fluxo de calor atravessa um meio compósito. Então, apresentaremos a importante ferramenta matemática da homogeneização. Primeiramente a formulação da homogeneização convencional e, em seguida, a formulação da homogeneização reiterada. Antes de encerrar a seção, deduziremos a relação entre as frações de volume, que será importante quando formos apresentar os resultados obtidos.

Ao final do capítulo 4, apresentamos um procedimento e um algoritmo de cálculo que podem servir de guia para que a condutividade térmica efetiva de meios heterogêneos com múltiplas escalas possa ser calculada via homogeneização reiterada e elementos finitos. Uma leitura prévia desta seção, 4.5, pode ajudar a compreender a homogeneização convencional e a reiterada, além de deixar claro o objetivo da formulação nas seções 3 e 4.

#### 3.1 A condução de calor

Supondo que o fluxo de calor seja linearmente dependente do gradiente de temperatura, temos a Lei de Fourier,

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K}\nabla T, \quad (3.1)$$

$\mathbf{K}$  é o tensor de condutividade. Trabalharemos com a hipótese de que a Lei de Fourier nos dará bons resultados em todas as escalas consideradas.

No equilíbrio, o fluxo de calor para fora da região  $\Omega$  é igual à geração por uma fonte dentro da região, tal que

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS = \int_{\Omega} f dx, \quad (3.2)$$

onde  $\mathbf{n}$  é o vetor normal apontando para fora da fronteira  $\partial\Omega$  de  $\Omega$ . Aplicando o teorema da divergência em (3.2), obtemos

$$\int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{q} - f) dx = 0. \quad (3.3)$$

Como a equação (3.3) é válida para uma região arbitrária, concluímos que

$$\nabla \cdot \mathbf{q} = f. \quad (3.4)$$

Substituindo (3.1) em (3.4),

$$\nabla \cdot (-\mathbf{K}\nabla T) = f, \quad (3.5)$$

ou, em notação indicial,

$$-\frac{\partial}{\partial x_i} \left[ k_{ij}(x) \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] = f(x). \quad (3.6)$$

Definindo

$$K \equiv -\frac{\partial}{\partial x_i} \left[ k_{ij}(x) \frac{\partial}{\partial x_j} \right], \quad (3.7)$$

temos

$$KT = f. \quad (3.8)$$

### 3.2 A condução de calor em compósitos

A condutividade pode ser uma função periódica da posição. No compósito ilustrado na figura 3.1, existem duas condutividades:  $k_c$  e  $k_d$  (a condutividade térmica

do meio contínuo e do meio descontínuo, respectivamente). Os componentes são supostos sólidos, homogêneos e isotrópicos. As coordenadas espaciais são  $(x_1, x_2) = \mathbf{x} \in R^2$  e as regiões ocupadas pelos componentes contínuos e descontínuos são, respectivamente,  $\Omega_c$  e  $\Omega_d$ . Fisicamente, o compósito se estende através de um comprimento característico  $L$ . Gradientes de temperatura  $\Delta T/L$  são impostos à escala maior  $L$ , a chamada macroescala. Essa região da macroescala é dada por  $\Omega_{ma} = \Omega_c \cup \Omega_d$ .  $\partial\Omega_s$  é a união de todas as interfaces entre a matriz e as fibras, a célula periódica é denotada por  $\Omega_{sc}$  e o contorno do compósito, onde as condições de contorno são especificadas, é dado por  $\partial\Omega_{ma}$ .

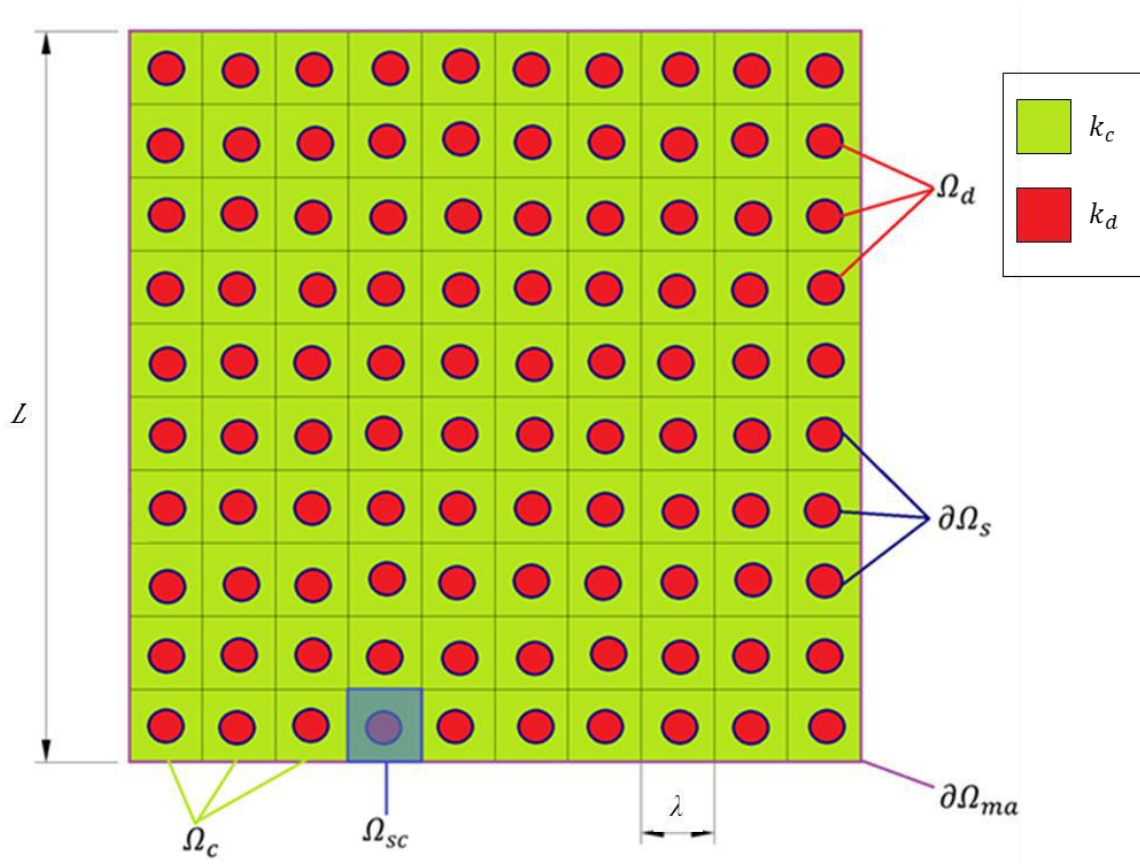


Figura 3.1 Compósito periódico bidimensional. Adaptada de (CRUZ, 1997).

A condução de calor no meio descrito acima, sob condições permanentes, pode ser expressa matematicamente por

$$-\frac{\partial}{\partial x_j} \left( k_c \frac{\partial T^c}{\partial x_j} \right) = g_c \text{ em } \Omega_c, \quad (3.9)$$

$$-\frac{\partial}{\partial x_j} \left( k_d \frac{\partial T^d}{\partial x_j} \right) = g_d \text{ em } \Omega_d, \quad (3.10)$$

$$T^c = T^d \text{ em } \partial\Omega_s, \quad (3.11)$$

$$-k_c \frac{\partial T^c}{\partial x_j} n_j = -k_d \frac{\partial T^d}{\partial x_j} n_j \text{ em } \partial\Omega_s, \quad (3.12)$$

$$T^c \text{ e } T^d \text{ sujeitas às condições de contorno em } \partial\Omega_{ma}. \quad (3.13)$$

Aqui,  $T^c$ ,  $T^d$ ,  $g_c$  e  $g_d$  são, respectivamente, o campo de temperatura e a taxa de geração de calor nos componentes contínuos e descontínuos,  $\mathbf{n}$  é o vetor unitário localmente normal a  $\partial\Omega_s$  e apontando em direção a  $\Omega_d$ . Os gradientes de temperatura externos são impostos através das condições de contorno em (3.13), de modo a gerar o fluxo de calor pelo meio. O contato térmico perfeito entre as fases implica na continuidade da temperatura através de  $\partial\Omega_s$ , (3.11).

O problema (3.9) – (3.12) pode ser reescrito como

$$K^\varepsilon T_\varepsilon = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left( k \frac{\partial T_\varepsilon}{\partial x_j} \right) = g \text{ em } \Omega_{ma}, \quad (3.14)$$

$$[T_\varepsilon]_{\partial\Omega_s} = 0, \quad (3.15)$$

$$\left[ -k \frac{\partial T_\varepsilon}{\partial x_j} \right]_{\partial\Omega_s} n_j = 0, \quad (3.16)$$

$$T_\varepsilon \text{ sujeita às condições de contorno em } \partial\Omega_{ma}, \quad (3.17)$$

onde, respectivamente,  $k, T_\varepsilon, g$  igual a  $k_c, T^c, g_c$  em  $\Omega_c \subset \Omega_{ma}$  e a  $k_d, T^d, g_d$  em  $\Omega_d \subset \Omega_{ma}$ . Já a notação  $[\phi]_{\partial\Omega_s}$  é usada para indicar a descontinuidade (ou salto) da função  $\phi$  em  $\partial\Omega_s$ . Notamos que, para este problema, o coeficiente  $k_{ij} = k\delta_{ij}$  ( $\delta_{ij}$  é o delta de

Kronecker) do operador  $K^\varepsilon$  na equação (3.14), é isotrópico e descontínuo, assumindo diferentes valores (constantes ou variáveis) nos dois componentes.

### 3.3 Homogeneização convencional

O problema de valor de contorno (3.14) é do tipo 1, como apresentamos no primeiro capítulo (seção 1.1). Então, desejamos agora substituir o operador  $K^\varepsilon$  (do P. V. C.-1) pelo operador  $K^H$  (do P. V. C.-2), para que possamos posteriormente aplicar o método dos elementos finitos e resolvê-lo. Usaremos a técnica de expansões assintóticas usando múltiplas escalas, que é especialmente atrativa para problemas do tipo P. V. C.-1 no caso em que existe uma escala medindo variações no interior da célula periódica – a escala rápida  $\lambda$  – e outra medindo variações no interior da região de interesse – a escala lenta  $L$  (BENSOUSSAN *et al*, 1978).

#### 3.3.1 Expansões Assintóticas

No estudo de materiais compósitos, propriedades macroscópicas de estruturas cristalinas ou poliméricas, entre outros, somos levados a estudar a equação (3.8) em meios com estruturas periódicas. Se o período da estrutura é pequeno comparado com o tamanho da região a ser estudada, então uma análise assintótica é adequada. Com uma expansão assintótica da solução em termos do parâmetro  $\varepsilon$ , será possível passar de uma descrição microscópica para a descrição macroscópica do comportamento do sistema. A seguir, será apresentada a formulação matemática da homogeneização. Essa apresentação será feita de maneira mais generalizada, onde  $u$  é uma quantidade conservada e  $A^\varepsilon$  um operador linear genérico. Neste trabalho,  $u$  corresponde à temperatura, mas em estudos de meios porosos pode corresponder à pressão e no estudo da eletrostática à indução elétrica.

A proposta é que a dependência de  $u$  sobre  $\mathbf{x}$  possa ser desdobrada em uma dependência com parte periódica ( $\mathbf{x}/\varepsilon$ ) e uma dependência com parte não periódica ( $\mathbf{x}$ ),

$$u(\mathbf{x}) \cong u_\varepsilon(\mathbf{x}) = u_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}/\varepsilon) + \varepsilon u_1(\mathbf{x}, \mathbf{x}/\varepsilon) + \varepsilon^2 u_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}/\varepsilon) + \dots \quad (3.18)$$

De (1.12), sabemos que  $\mathbf{y} = \mathbf{x}/\varepsilon$ , onde  $\mathbf{x}$  é a coordenada espacial lenta e  $\mathbf{y}$  é a rápida (ver figura 1.2-a). Logo,

$$u_\varepsilon(\mathbf{x}) = u_0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon u_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon^2 u_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \dots \quad (3.19)$$

Uma família de operadores diferenciais parciais  $A^\varepsilon$  dependente do parâmetro  $\varepsilon$  é dada. Esses operadores podem ser dependentes ou não do tempo, lineares ou não, e têm coeficientes que são funções periódicas em todas ou em algumas variáveis com períodos proporcionais a  $\varepsilon$ . Como  $\varepsilon$  é suposto pequeno, temos uma família de operadores que oscilam rapidamente.

Aqui será considerado o operador (BENSOUSSAN *et al*, 1978)

$$A^\varepsilon = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left( a_{ij} \left( \frac{\mathbf{x}}{\varepsilon} \right) \frac{\partial}{\partial x_j} \right) + a_0 \left( \frac{\mathbf{x}}{\varepsilon} \right). \quad (3.20)$$

Para o problema abordado neste trabalho, o de condução de calor,  $a_0$  é igual a zero, mas, para manter a generalidade, seguiremos com  $a_0$  neste momento. Em um domínio  $\Omega$ , temos um problema de valor de contorno do tipo 1,

$$A^\varepsilon u_\varepsilon = f \quad \text{em } \Omega, \quad (3.21)$$

$$u_\varepsilon \text{ sujeito às condições de contorno apropriadas.} \quad (3.22)$$

O problema agora é obter, se possível, uma expansão de  $u_\varepsilon$  na forma de (3.18).

Uma atenção é necessária com o operador  $\frac{\partial}{\partial x_j}$ . Quando operando com uma função  $F = \hat{F}(\mathbf{x}) = \tilde{F}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ , devemos tratar  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$  como variáveis independentes e em seguida substituir  $\mathbf{y}$  por  $\mathbf{x}/\varepsilon$ , obtendo, através da Regra da Cadeia,

$$\frac{\partial}{\partial x_j} [F] = \frac{\partial \hat{F}}{\partial x_j} = \frac{\partial \tilde{F}}{\partial x_j} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \tilde{F}}{\partial y_j}. \quad (3.23)$$

Substituindo (3.23) em (3.20), obtemos

$$A^\varepsilon = \varepsilon^{-2}A_1 + \varepsilon^{-1}A_2 + \varepsilon^0A_3, \quad (3.24)$$

onde

$$A_1 \equiv -\frac{\partial}{\partial y_i} \left( a_{ij}(y) \frac{\partial}{\partial y_j} \right), \quad (3.25)$$

$$A_2 \equiv -\frac{\partial}{\partial y_i} \left( a_{ij}(y) \frac{\partial}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( a_{ij}(y) \frac{\partial}{\partial y_j} \right), \quad (3.26)$$

$$A_3 \equiv -\frac{\partial}{\partial x_i} \left( a_{ij}(y) \frac{\partial}{\partial x_j} \right) + a_0. \quad (3.27)$$

Substituindo (3.25), (3.26), (3.27) e (3.19) em (3.21) e separando pelas potências de  $\varepsilon$ , chegamos a

$$A_1 u_0 = 0, \quad (3.28)$$

$$A_1 u_1 + A_2 u_0 = 0, \quad (3.29)$$

$$A_1 u_2 + A_2 u_1 + A_3 u_0 = f. \quad (3.30)$$

### 3.3.2 A Condição de Solução

Antes de prosseguirmos, vamos definir a condição de solução, que foi provada por BAKHVALOV e PANASENKO (1989) e será necessária mais à frente. Para o problema de valor de contorno,

$$A_1 u = F \text{ em } Y, \quad (3.31)$$

$$u \text{ periódico em } Y, \quad (3.32)$$



a condição

$$\int_Y F(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = 0. \quad (3.33)$$

é necessária e suficiente para garantir a existência de uma solução periódica, que, acrescida de uma constante, é única.

Agora que temos a condição de solução, podemos começar a resolver as equações (3.28) a (3.30). Como o operador  $A_1$  envolve apenas a variável  $\mathbf{y}$  e considerando a condição de solução, concluímos que (3.28) implica em  $u_0(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  ser função apenas de  $\mathbf{x}$ , ou seja,

$$u_0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = u_0(\mathbf{x}). \quad (3.34)$$

(3.29) se reduz a

$$A_1 u_1 = \left( \frac{\partial a_{ij}(\mathbf{y})}{\partial y_j} \right) \frac{\partial u_0(\mathbf{x})}{\partial x_j}. \quad (3.35)$$

Para resolvermos a equação (3.35), precisamos agora fazer a separação das variáveis  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$  do seu lado direito. Para isso, definimos  $\chi^j = \chi^j(\mathbf{y})$  como a solução (acrescida de uma constante) de (BENSOUSSAN *et al*, 1978)

$$A_1 \chi^j = - \frac{\partial a_{ij}(\mathbf{y})}{\partial y_j}. \quad (3.36)$$

$\chi^j$  tem dimensão de comprimento e, fisicamente, é a temperatura local dividida pelo gradiente de temperatura que provoca o fluxo de calor no meio. Substituindo (3.36) em (3.35), obtemos que

$$u_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -\chi^j(\mathbf{y}) \frac{\partial u_0(\mathbf{x})}{\partial x_j} + \tilde{u}_1(\mathbf{x}). \quad (3.37)$$

O problema para determinar  $u_1$  então se reduz a encontrar  $\chi^j(\mathbf{y})$ . Como  $A_1$  envolve apenas a variável  $\mathbf{y}$  e tanto  $a_{ij}(\mathbf{y})$  quanto  $\chi^j(\mathbf{y})$  são  $Y$ -periódicas<sup>1</sup>, a equação (3.36) – com as condições de contorno adequadas – constitui o problema de célula P. V. C.-3.

Vamos agora resolver a equação (3.30). Da condição de solução,  $\int_Y A_1 u_2 = 0$ . Ficamos então com

$$\int_Y (A_2 u_1 + A_3 u_0) d\mathbf{y} = \int_Y f d\mathbf{y}. \quad (3.38)$$

Substituindo as fórmulas para  $A_2$  e  $A_3$  – (3.26) e (3.27), respectivamente – além da equação para  $u_1$ , (3.37), e sabendo que  $f$  é função apenas de  $\mathbf{x}$ , obtemos

$$\begin{aligned} \int_Y \left( -\frac{\partial}{\partial x_i} \left( a_{ik}(\mathbf{y}) \frac{\partial}{\partial y_k} \left( -\chi^j(\mathbf{y}) \frac{\partial u_0(\mathbf{x})}{\partial x_j} + \tilde{u}_1(\mathbf{x}) \right) \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( a_{ij}(\mathbf{y}) \frac{\partial u_0}{\partial x_j} \right) \right. \\ \left. + a_0 u_0 \right) d\mathbf{y} = f \int_Y d\mathbf{y}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Logo,

$$\frac{1}{|Y|} \left( \int_Y \left( a_{ij} - a_{ik} \frac{\partial \chi^j}{\partial y_k} \right) d\mathbf{y} \right) \frac{\partial^2 u_0}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{1}{|Y|} \left( \int_Y a_0(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \right) u_0 = f. \quad (3.40)$$

onde

$$|Y| = \int_Y d\mathbf{y}. \quad (3.41)$$

---

<sup>1</sup> Característica da função que tem período  $y_j^0$  na direção  $y_j, j=1, 2, \dots, n$ .

Definindo, de maneira geral,

$$m(\phi) \equiv -\frac{1}{|Y|} \left( \int_Y F(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \right). \quad (3.42)$$

e definindo os coeficientes (que são constantes)

$$C_{effij} \equiv -\frac{1}{|Y|} \left( \int_Y \left( a_{ij} - a_{ik} \frac{\partial X^j}{\partial y_k} \right) d\mathbf{y} \right) = -m(a_{ij}) + m \left( a_{ik} \frac{\partial X^j}{\partial y_k} \right), \quad (3.43)$$

e

$$C_0 \equiv \frac{1}{|Y|} \int_Y a_0(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = m(a_0), \quad (3.44)$$

reescrevemos (3.40) como

$$C_{effij} \frac{\partial^2 u_0}{\partial x_i \partial x_j} + C_0 u_0 = f. \quad (3.45)$$

Com isso,

$$A^H \equiv C_{effij} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} + C_0 \quad (3.46)$$

e formamos finalmente o P. V. C.-2

$$A^H u_0 = f \quad \text{em } \Omega, \quad (3.47)$$

$$u_0 \text{ sujeito às condições de contorno apropriadas.} \quad (3.48)$$

Matematicamente,  $C_{effij}$  e  $C_0$  são os coeficientes efetivos do operador  $A^\varepsilon$ .

### 3.4 Homogeneização Reiterada

A partir de agora, desenvolvemos a formulação matemática necessária para obter os problemas de valor de contorno homogeneizados em meios com mais de um nível microscópico, a homogeneização reiterada (RODRÍGUEZ *et al.*, 2015). Diferentemente da homogeneização convencional, que apresentamos de maneira genérica, aplicamos a seguir a formulação da homogeneização convencional ao P. V. C. da condução de calor permanente em um meio multiescala,

$$-\frac{\partial}{\partial x_i} \left[ k_{ij}^\varepsilon \frac{\partial T_\varepsilon}{\partial x_j} \right] = g \text{ em } \Omega_{ma}, \quad (3.49)$$

$$\left[ -k_{ij}^\varepsilon \frac{\partial T_\varepsilon}{\partial x_j} \right]_{\partial \Omega_s} n_i = 0 \text{ em } \partial \Omega_s, \quad (3.50)$$

$$[T_\varepsilon]_{\partial \Omega_s} = 0 \text{ em } \partial \Omega_s, \quad (3.51)$$

apresentado aqui usando notação indicial. Nas equações (3.49) a (3.51),  $k_{ij}^\varepsilon, T_\varepsilon, g$  são iguais a  $k_{ij}^c, T^c, g_c$  em  $\Omega_c \subset \Omega_{ma}$  e igual a  $k_{ij}^d, T^d, g_d$  em  $\Omega_d \subset \Omega_{ma}$ , respectivamente. Mas, agora, o compósito é periódico em duas escalas,

$$\mathbf{y} \equiv \frac{\mathbf{x}}{\varepsilon} \quad (3.52)$$

e

$$\mathbf{z} \equiv \frac{\mathbf{y}}{\varepsilon} = \frac{\mathbf{x}}{\varepsilon^2}, \quad (3.53)$$

tal que  $k_{ij}^\varepsilon = k_{ij}^\varepsilon(\mathbf{y}, \mathbf{z})$  é uma função periódica em  $Y$  e em  $Z$  e definida em trechos, e  $\mathbf{y}$  e  $\mathbf{z}$  representam o sistema de coordenadas da escala intermediária e da microescala, respectivamente (figura 1.2-b).

### 3.4.1 Expansões Assintóticas

Busca-se uma solução na forma de uma expansão assintótica de múltiplas escalas,

$$T_\varepsilon(\mathbf{x}) = T_0(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) + \varepsilon T_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) + \varepsilon^2 T_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) + \varepsilon^3 T_3(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) + \varepsilon^4 T_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) + O(\varepsilon^5), \quad (3.54)$$

em que  $T_0, T_1, T_2, T_3$  e  $T_4$  são funções diferenciáveis e  $Y$ -periódicas em respeito a  $\mathbf{y}$  e  $Z$ -periódicas<sup>2</sup> em  $\mathbf{z}$ . A regra da cadeia para uma função  $F(\mathbf{x}) = \tilde{F}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$  é

$$\frac{\partial F}{\partial x_j} = \frac{\partial \tilde{F}}{\partial x_j} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \tilde{F}}{\partial y_j} + \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\partial \tilde{F}}{\partial z_j}. \quad (3.55)$$

Aplicamos agora (3.55) no P. V. C. (3.49). Para melhor apresentação do resultado, definimos

$$L_{p,q} \equiv \frac{\partial}{\partial p_i} \left( k_{ij}^\varepsilon \frac{\partial}{\partial q_j} \right). \quad (3.56)$$

E (3.49) fica igual a

$$-\varepsilon^{-4} L^1 T_\varepsilon - \varepsilon^{-3} L^2 T_\varepsilon - \varepsilon^{-2} L^3 T_\varepsilon - \varepsilon^{-1} L^4 T_\varepsilon - \varepsilon^0 L^5 T_\varepsilon = \dot{g} \text{ em } \Omega_{ma}, \quad (3.57)$$

onde

$$L^1 \equiv L_{z,z}, \quad (3.58)$$

$$L^2 \equiv L_{y,z} + L_{z,y}, \quad (3.59)$$

---

<sup>2</sup> Característica da função que tem período  $z_j^0$  na direção  $z_j, j=1, 2, \dots, n$ .

$$L^3 \equiv L_{x,z} + L_{y,y} + L_{z,x}, \quad (3.60)$$

$$L^4 \equiv L_{x,y} + L_{y,z}, \quad (3.61)$$

$$L^5 \equiv L_{x,x}. \quad (3.62)$$

Substituindo (3.54) em (3.57),

$$\begin{aligned} & -\varepsilon^{-4}L^1T_0 - \varepsilon^{-3}(L^1T_1 + L^2T_0) - \varepsilon^{-2}(L^1T_2 + L^2T_1 + L^3T_0) \\ & - \varepsilon^{-1}(L^1T_3 + L^2T_2 + L^3T_1 + L^4T_0) \\ & - \varepsilon^0(L^1T_4 + L^2T_3 + L^3T_2 + L^4T_1 + L^5T_0) = \dot{g} \text{ em } \Omega_{ma}. \end{aligned} \quad (3.63)$$

Agora, substituimos (3.55) e (3.57) - (3.62) nas condições de contorno (3.50) e (3.51) e obtemos

$$\begin{aligned} & \left\{ -k_{ij}^\varepsilon \left[ \varepsilon^{-2} \frac{\partial T_0}{\partial z_j} + \varepsilon^{-1} \left( \frac{\partial T_1}{\partial z_j} + \frac{\partial T_0}{\partial y_j} \right) + \varepsilon^0 \left( \frac{\partial T_0}{\partial x_j} + \frac{\partial T_1}{\partial y_j} + \frac{\partial T_2}{\partial z_j} \right) \right. \right. \\ & \quad + \varepsilon^1 \left( \frac{\partial T_1}{\partial x_j} + \frac{\partial T_2}{\partial y_j} + \frac{\partial T_3}{\partial z_j} \right) + \varepsilon^2 \left( \frac{\partial T_2}{\partial x_j} + \frac{\partial T_3}{\partial y_j} + \frac{\partial T_4}{\partial z_j} \right) \\ & \quad \left. \left. + \varepsilon^3 \left( \frac{\partial T_3}{\partial x_j} + \frac{\partial T_4}{\partial y_j} \right) + \varepsilon^4 \left( \frac{\partial T_4}{\partial x_j} \right) \right] n_i \right\}_{\partial\Omega_s} = 0 \text{ em } \partial\Omega_s, \end{aligned} \quad (3.64)$$

$$[T_0 + \varepsilon T_1 + \varepsilon^2 T_2 + \varepsilon^3 T_3 + \varepsilon^4 T_4]_{\partial\Omega_s} = 0 \text{ em } \partial\Omega_s. \quad (3.65)$$

Vamos separar a equação (3.63) e as condições de contorno pelas potências de  $\varepsilon$ . Coletando termos de ordem  $\varepsilon^{-4}$  e  $\varepsilon^{-2}$  em (3.63) e (3.64), respectivamente, obtemos

$$L^1T_0 = 0 \text{ em } \Omega_{ma}, \quad (3.66)$$

$$\left\{ -k_{ij}^{\varepsilon} \frac{\partial T_0}{\partial z_j} \right\}_{\partial \Omega_s} = 0 \text{ em } \partial \Omega_s, \quad (3.67)$$

Considerando  $k_{ij}^{\varepsilon} \neq 0$ ,

$$\frac{\partial T_0}{\partial z_j} = 0. \quad (3.68)$$

Logo  $T_0$  não varia na menor escala,  $\mathbf{z}$ , e é função de  $\mathbf{x}$  e de  $\mathbf{y}$  apenas. Já coletando termos de Ordem  $\varepsilon^{-3}$  em (3.63), obtemos

$$L^1 T_1 + L^2 T_0 = 0 \text{ em } \Omega_{ma}, \quad (3.69)$$

Desenvolvendo (3.69), podemos chegar a

$$L^1 T_1 = \frac{\partial}{\partial z_i} \left( k_{ij}^{\varepsilon} \frac{\partial T_1}{\partial z_j} \right) = - \frac{\partial k_{ij}^{\varepsilon}}{\partial z_i} \frac{\partial \tilde{T}_0}{\partial y_j} \text{ em } \Omega_{ma}. \quad (3.70)$$

Analogamente à formulação da homogeneização convencional, propomos agora uma solução para  $T_1$  na forma

$$T_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = -\chi_y^p(\mathbf{z}) \frac{\partial \tilde{T}_0(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial y_p} + \tilde{T}_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad (3.71)$$

onde  $\chi_y^p(\mathbf{z})$  é a solução do primeiro problema local ou problema de célula em  $Z$ , definido a seguir. Substituindo (3.71) em (3.70) obtemos

$$\frac{\partial}{\partial z_i} \left( k_{ij}^{\varepsilon} \frac{\partial \chi_y^p}{\partial z_j} - k_{ip}^{\varepsilon} \right) = 0. \quad (3.72)$$

ou

$$L^1(\chi_y^j - z_j) = 0. \quad (3.73)$$

Para impor a unicidade, se requer que

$$\int_Z \chi_y^p(\mathbf{z}) d\mathbf{z} = 0. \quad (3.74)$$

Agora, coletamos termos de ordem  $\varepsilon^{-2}$  em (3.63) e obtemos

$$L^1 T_2 + L^2 T_1 + L^3 T_0 = 0 \text{ em } \Omega_{ma}, \quad (3.75)$$

Desenvolvendo a equação (3.75),

$$-L^1 T_2 = L_{y,z} T_1 + L_{z,y} T_1 + L_{x,z} T_0 + L_{y,y} T_0 + L_{z,x} T_0, \quad (3.76)$$

e inserindo (3.71),

$$\begin{aligned} -L^1 T_2 = & -\frac{\partial}{\partial y_i} \left( k_{ij}^\varepsilon \frac{\partial \chi_y^p}{\partial z_j} \frac{\partial \widetilde{T}_0}{\partial y_p} \right) + \frac{\partial}{\partial y_i} \left( k_{ij}^\varepsilon \frac{\partial \widetilde{T}_0}{\partial y_j} \right) + \frac{\partial}{\partial z_i} \left( -k_{ij}^\varepsilon \chi_y^p \frac{\partial \widetilde{T}_0}{\partial y_p} + k_{ij}^\varepsilon \frac{\partial \widetilde{T}_1}{\partial y_p} + \right. \\ & \left. k_{ij}^\varepsilon \frac{\partial \widetilde{T}_0}{\partial x_j} \right), \end{aligned} \quad (3.77)$$

Usando a condição de solução (equações (3.31) - (3.33)), concluímos que a condição necessária e suficiente para que (3.77) possa ser resolvida é

$$-\frac{\partial}{\partial y_i} \frac{1}{|z|} \left[ \int_Z \left( k_{ij}^\varepsilon - k_{ik}^\varepsilon \frac{\partial \chi_y^j}{\partial z_k} \right) d\mathbf{z} \right] \frac{\partial \widetilde{T}_0}{\partial y_j} = 0. \quad (3.78)$$

Definindo  $k_{ij}^1(\mathbf{y})$  como a condutividade térmica efetiva do primeiro problema homogeneizado, temos que

$$k_{ij}^1(\mathbf{y}) \equiv \int_Z \left( k_{ip}^\varepsilon - k_{ij}^\varepsilon \frac{\partial \chi_y^p}{\partial z_j} \right) d\mathbf{z}. \quad (3.79)$$



Definimos então o operador  $a_1$ , que é igual a (RODRÍGUEZ *et al.*, 2015)

$$a_1 \equiv -\frac{\partial}{\partial y_i} [k_{ij}^1(\mathbf{y})] \frac{\partial}{\partial y_j}. \quad (3.80)$$

Podemos então reescrever (3.78) com a notação do operador e chegamos a

$$a_1 \tilde{T}_0 = 0, \quad (3.81)$$

e podemos concluir que  $\tilde{T}_0$  não varia na escala intermediária  $\mathbf{y}$ , sendo função apenas de  $\mathbf{x}$ ,

$$T_0 = \tilde{T}_0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = T(\mathbf{x}). \quad (3.82)$$

Substituindo (3.82) em (3.71),

$$T_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \tilde{T}_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}). \quad (3.83)$$

Logo,  $T_1$  não varia na menor escala,  $\mathbf{z}$ . Substituindo (3.82) e (3.83) em (3.77),

$$-L^1 T_2 = \frac{\partial k_{ij}^\varepsilon}{\partial z_i} \left( \frac{\partial \tilde{T}_1}{\partial y_j} + \frac{\partial T}{\partial x_j} \right). \quad (3.84)$$

Com base na equação (3.84), fazemos como anteriormente e propomos para  $T_2$  a separação das variáveis  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{y}$ ,  $\mathbf{z}$  na forma análoga à proposta para  $T_1$ ,

$$T_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = -\chi_y^p(\mathbf{z}) \left( \frac{\partial \tilde{T}_1}{\partial y_p} + \frac{\partial T}{\partial x_p} \right) + \tilde{T}_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}). \quad (3.85)$$

Coletando termos de ordem  $\varepsilon^{-1}$  em (3.63),

$$L^1 T_3 + L^2 T_2 + L^3 T_1 + L^4 T_0 = 0 \text{ em } \Omega_{ma}, \quad (3.86)$$

A condição necessária e suficiente para que (3.86) possa ser resolvida para  $T_3$  é

$$a_1 \tilde{T}_1 = -(a_1 y_p) \frac{\partial T}{\partial x_p} \text{ em } \Omega_{ma}. \quad (3.87)$$

Propondo para  $\tilde{T}_1$  a separação das variáveis  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$  na forma análoga à proposta para  $T_1$ ,

$$\tilde{T}_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -\chi^p(\mathbf{y}) \frac{\partial T}{\partial x_p} + \tilde{\tilde{T}}_1(\mathbf{x}). \quad (3.88)$$

Substituindo (3.88) em (3.85) obtemos

$$T_2 = -\chi_l^y(\mathbf{z}) \left( \frac{\partial T(\mathbf{x})}{\partial x_l} - \frac{\partial \chi^p(\mathbf{y})}{\partial y_l} \frac{\partial T(\mathbf{x})}{\partial x_l} \right) + \tilde{T}_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad (3.89)$$

e substituindo (3.88) em (3.87) chegamos a

$$a_1(\chi^q - y_q) = \frac{\partial}{\partial y_i} \left[ k_{iq}^1 - k_{ij}^1 \frac{\partial \chi^q}{\partial y_j} \right] = 0 \text{ em } \Omega_{ma}. \quad (3.90)$$

Já coletando termos de ordem  $\varepsilon^0$  em (3.63),

$$-(L^1 T_4 + L^2 T_3 + L^3 T_2 + L^4 T_1 + L^5 T_0) = g \text{ em } \Omega_{ma}. \quad (3.91)$$

Desenvolvendo (3.91),

$$-L^1 T_4 = L^2 T_3 + L^3 T_2 + L^4 T_1 + L^5 T_0 + g \text{ em } \Omega_{ma}, \quad (3.92)$$

para que (3.92) possa ser resolvida, é necessário e suficiente que

$$\frac{1}{|Z|} \int_Z (L^2 T_3 + L^3 T_2 + L^4 T_1 + L^5 T_0 + g) d\mathbf{z} = 0. \quad (3.93)$$

Aplicando a média volumétrica para (3.93),

$$\frac{1}{|Y|} \frac{1}{|Z|} \int_Y \int_Z (L^2 T_3 + L^3 T_2 + L^4 T_1 + L^5 T_0 + \dot{g}) dz d\mathbf{y} = 0. \quad (3.94)$$

Substituindo as expressões para  $T_0$ ,  $T_2$  e, posteriormente, para  $\tilde{T}_1$ , podemos reescrever o problema (3.94) como

$$-\hat{k}_{ij} \frac{\partial^2 T}{\partial x_i \partial x_j} = \dot{g} \text{ em } \Omega, \quad (3.95)$$

que é o segundo problema homogeneizado, onde  $\hat{k}_{ij}$  é a condutividade térmica efetiva, definida como

$$\hat{k}_{ij} \equiv \int_Y \left( k_{ij}^1 - k_{im}^1 \frac{\partial \chi^j}{\partial y_m} \right) d\mathbf{y} \text{ em } \Omega_{ma}. \quad (3.96)$$

Ao aplicarmos o método da homogeneização reiterada, substituímos o problema original – equações (3.49) a (3.51) – pelo problema homogeneizado (3.95). A matriz simétrica, positiva definida  $\hat{\mathbf{K}}=(\hat{k}_{ij})$  é formada pelos coeficientes efetivos que governam o comportamento macroscópico do meio heterogêneo original.

Antes de definirmos os problemas locais que iremos resolver para encontrar  $k_{ij}^1$  e  $\hat{k}_{ij}$ , precisamos analisar as condições de contorno (3.64) e (3.65).

Igualando a zero termos correspondentes à mesma potência de  $\varepsilon$  em (3.65), temos

$$\text{de } \varepsilon^0, \quad [T_0]_{\partial\Omega_s} = 0, \quad (3.97)$$

$$\text{de } \varepsilon^1, \quad [T_1]_{\partial\Omega_s} = 0, \quad (3.98)$$

$$\text{de } \varepsilon^2, \quad [T_2]_{\partial\Omega_s} = 0. \quad (3.99)$$

De (3.82) e (3.97) e da condição que  $T_0$ ,  $T_1$ ,  $T_2$ ,  $T_3$  e  $T_4$  são funções diferenciáveis, se conclui que  $T(\mathbf{x})$  e suas derivadas são contínuas através de  $\partial\Omega_s$ .

Combinando as equações (3.88) e (3.98),

$$\left[ -\chi^p(\mathbf{y}) \frac{\partial T}{\partial x_p} + \tilde{T}_1(\mathbf{x}) \right]_{\partial\Omega_s} = 0. \quad (3.100)$$

Para que a equação (3.100) seja satisfeita é suficiente requerermos que

$$[\chi^p]_{\partial\Omega_s} = 0. \quad (3.101)$$

Também combinamos a equação (3.89) com a (3.99) e obtemos

$$[\chi_y^l]_{\partial\Omega_s} = 0. \quad (3.102)$$

Agora, vamos analisar a outra condição de contorno. igualando a zero termos correspondentes à mesma potência de  $\varepsilon$  em (3.64), temos

$$\text{de } \varepsilon^{-2}, \quad \left[ -k_{ij} \frac{\partial T_0}{\partial z_j} \right]_{\partial\Omega_s} n_i = 0 \text{ em } \partial\Omega_s, \quad (3.103)$$

$$\text{de } \varepsilon^{-1}, \quad \left[ -k_{ij} \left( \frac{\partial T_1}{\partial z_j} + \frac{\partial T_0}{\partial y_j} \right) \right]_{\partial\Omega_s} n_i = 0 \text{ em } \partial\Omega_s, \quad (3.104)$$

$$\text{de } \varepsilon^0, \quad \left[ -k_{ij} \left( \frac{\partial T_0}{\partial x_j} + \frac{\partial T_1}{\partial y_j} + \frac{\partial T_2}{\partial z_j} \right) \right]_{\partial\Omega_s} n_i = 0 \text{ em } \partial\Omega_s. \quad (3.105)$$

De (3.82) e (3.83), sabemos que as condições (3.103) e (3.104) estão atendidas. Combinando (3.82), (3.83) e (3.85) em (3.105) obtemos

$$\left[ -k_{ij} \left( \frac{\partial T}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{T}_1}{\partial y_j} - \frac{\partial \chi_y^p}{\partial z_j} \left( \frac{\partial \tilde{T}_1}{\partial y_p} + \frac{\partial T}{\partial x_p} \right) + \frac{\partial \tilde{T}_2}{\partial z_j} \right) \right]_{\partial\Omega_s} n_i = 0 \text{ em } \partial\Omega_s. \quad (3.106)$$

ou

$$\left[ - \left( k_{il} - k_{ij} \frac{\partial \chi_y^l}{\partial z_j} \right) \left( \frac{\partial T}{\partial x_l} + \frac{\partial \tilde{T}_1}{\partial y_l} \right) \right]_{\partial\Omega_s} n_i = 0 \text{ em } \partial\Omega_s. \quad (3.107)$$

Reconhecendo na equação (3.107) que  $T$ ,  $\tilde{T}_1$  e suas derivadas são contínuas através de  $\partial\Omega_s$ , a condição (3.105) será satisfeita se requerendo que

$$\left[ - \left( k_{il} - k_{ij} \frac{\partial \chi_y^l}{\partial z_j} \right) \right]_{\partial\Omega_s} n_i = 0 \text{ em } \partial\Omega_s. \quad (3.108)$$

Já a combinação das equações (3.82), (3.88), (3.89) e (3.105) nos fornece

$$\left[ \frac{\partial T}{\partial x_j} \left( -k_{ij} + k_{il} \frac{\partial \chi^j}{\partial y_l} + k_{il} \frac{\partial \chi_y^j}{\partial z_l} - k_{il} \frac{\partial \chi_y^m}{\partial z_l} \frac{\partial \chi^j}{\partial y_m} \right) \right]_{\partial\Omega_s} n_i = 0 \text{ em } \partial\Omega_s. \quad (3.109)$$

Dada a continuidade de  $T$  e suas derivadas através de  $\partial\Omega_s$  e aplicando sobre  $Z$  de (3.109), obtemos finalmente

$$\left[ - \left( k_{ij}^1 - k_{il}^1 \frac{\partial \chi^j}{\partial y_l} \right) \right]_{\partial\Omega_s} n_i = 0 \text{ em } \partial\Omega_s. \quad (3.110)$$

Com isso, podemos definir os dois problemas de célula que precisamos resolver para obter a condutividade térmica efetiva do meio.

#### 3.4.2 Primeiro Problema Local ou Primeiro Problema de Célula.

Para cada  $\mathbf{y} \in Y$ , achar a família paramétrica de funções  $Z$ -periódicas  $\{\chi_y^p(\mathbf{z})\}_{\mathbf{y} \in Y}$  tal que

$$L^1(\chi_y^j - z_j) = - \frac{\partial}{\partial z_i} \left( k_{ij} - k_{il} \frac{\partial \chi_y^j}{\partial z_l} \right) = 0, \quad (3.73)$$

$$\int_Z \chi_y^p(\mathbf{z}) d\mathbf{z} = 0, \quad (3.77)$$

$$\left[ - \left( k_{il} - k_{ij} \frac{\partial \chi_y^l}{\partial z_j} \right) \right]_{\partial \Omega_s} n_i = 0 \text{ em } \partial \Omega_s. \quad (3.108)$$

$$[\chi_y^l]_{\partial \Omega_s} = 0. \quad (3.102)$$

### 3.4.3 Segundo Problema Local ou Segundo Problema de Célula.

Para cada  $\mathbf{x} \in X$ , achar a família paramétrica de funções  $Y$ -periódicas  $\{\chi^q(\mathbf{y})\}_{\mathbf{y} \in Y}$  tal que

$$a_1(\chi^q - y_q) = \frac{\partial}{\partial y_i} \left[ k_{iq}^1 - k_{ij}^1 \frac{\partial \chi^q}{\partial y_j} \right] = 0 \text{ em } \Omega_{ma}. \quad (3.90)$$

$$[\chi^j]_{\partial \Omega_s} = 0 \text{ em } \partial \Omega_s, \quad (3.101)$$

$$\left[ - \left( k_{ij}^1 - k_{il}^1 \frac{\partial \chi^j}{\partial y_l} \right) \right]_{\partial \Omega_s} n_i = 0 \text{ em } \partial \Omega_s. \quad (3.110)$$

$$\int_{\mathbf{z}} \chi^j(\mathbf{z}) d\mathbf{z} = 0, \quad (3.109)$$

## 3.5 Relação Entre as Frações de Volume

Antes de encerrarmos esta seção em que abordamos a formulação do problema estudado, precisamos obter a relação entre as frações de volume. Esta relação será importante posteriormente para que possamos analisar situações em que a mesma quantidade de material está distribuída de maneiras diferentes pelos níveis microscópicos do meio. Na figura 3.2, a ilustração esquemática de dois domínios, um com duas escalas e outro com três, mas ambos com a mesma área ocupada pelo material descontínuo.

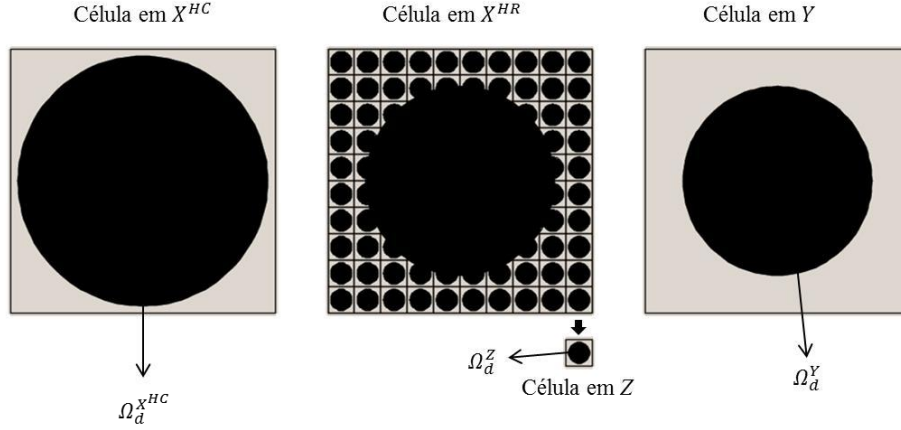


Figura 3.2 Ilustração esquemática de domínios com duas escalas (HC) e três escalas (HR) de um meio periódico binário – arranjo quadrado de cilindros circulares bidimensionais – com a mesma fração de volume  $\phi$  igual a 0,7.

Considere um meio periódico binário com um material isotrópico, fase  $d$ , disperso como inclusões ou partículas em outro material isotrópico, fase  $c$ . Os domínios das fases são, respectivamente,  $\Omega_d$  e  $\Omega_c$ . No desenvolvimento a seguir, o sobrescrito irá indicar a célula a qual o domínio se refere.

Observando a figura 3.2 e utilizando a equação (1.9), concluímos que a fração de volume  $\phi^{HC}$  é o volume da fase  $d$  na célula  $X^{HC}$ ,  $|\Omega_d^{X^{HC}}|$ , dividido pelo volume da célula,  $|X^{HC}|$ , tal que

$$|\Omega_d^{X^{HC}}| = \phi^{HC} |X^{HC}|. \quad (3.111)$$

De maneira similar, se for um meio com três escalas e periódico, então

$$|\Omega_d^{X^{HR}}| = \phi^{HR} |X^{HR}|. \quad (3.112)$$

Para esse meio de três escalas, na célula do nível  $Z$ , se define

$$|\Omega_d^Z| = \phi_Z^{HR} |Z| \quad (3.113)$$

e, na célula do nível  $Y$ ,

$$|\Omega_d^Y| = \phi_Y^{HR} |Y|. \quad (3.114)$$

Podemos perceber que  $|X^{HR}| = |Y|$ . Para podermos comparar a condutividade de meios periódicos com duas e três escalas, iguala-se  $|X^{HC}| = |X^{HR}|$  e se requer que o volume total ocupado pela fase  $d$  em uma célula em  $X^{HC}$  seja igual aos volumes ocupados em uma célula em  $X^{HR}$ . Então,

$$|\Omega_d^{X^{HC}}| = |\Omega_d^{X^{RC}}| = |\Omega_d^Y| + \sum_Z |\Omega_d^Z|, \quad (3.115)$$

onde o primeiro e o segundo termo no lado direito da equação (3.115) representam o volume ocupado pela fase  $d$  na fase  $Y$  e na fase  $Z$ , respectivamente. Como o somatório nas células do nível  $Z$  é tomado em um volume igual a  $(1 - \phi_Y^{HR})|Y|$ , e considerando as equações (3.113) e (3.114), concluímos que

$$|\Omega_d^{X^{HC}}| = |\Omega_d^{X^{RC}}| = \frac{(1 - \phi_Y^{HR})|Y|}{|Z|} \phi_Y^{HR} |Z| + \phi_Y^{HR} |Y|. \quad (3.116)$$

Dividindo a equação (3.115) por  $|X^{HC}| = |X^{HR}| = |Y|$ , obtemos

$$\phi^{HC} = \phi^{HR} = (1 - \phi_Y^{HR})\phi_Z^{HR} + \phi_Y^{HR}. \quad (3.117)$$

Deixando de lado os sobrescritos, concluímos que

$$\phi = (1 - \phi_Y)\phi_Z + \phi_Y. \quad (3.118)$$

Para uma dada fração global de volume  $\phi$ , a equação (3.118) dá a relação entre as frações de volume  $\phi_Y$  e  $\phi_Z$  em um intervalo  $0 \leq \phi_Z \leq \phi$  e  $\phi \geq \phi_Y \geq 0$ .



## 4 SOLUÇÃO NUMÉRICA

Neste trabalho, usamos técnicas numéricas para resolver o problema proposto, então apresentamos nesta seção as ferramentas necessárias para que possamos cumprir esse objetivo. Para podermos aplicar o método dos elementos finitos, precisamos da forma fraca do problema de condução de calor em um meio heterogêneo com múltiplas escalas. Uma vez obtida a forma fraca do problema, tratamos do método dos elementos finitos, da maneira como resolveremos o sistema de equações algébricas resultante e, em seguida, iremos propor três maneiras para calcular a condutividade térmica efetiva. Ao final da seção, apresentamos um algoritmo de cálculo que pode servir como um guia para que a condutividade térmica efetiva de meios heterogêneos com múltiplas escalas possa ser calculada via homogeneização reiterada e elementos finitos.

### 4.1 Forma fraca do problema de condução de calor em um meio heterogêneo com múltiplas escalas

A forma forte do problema de valor de contorno da condução de calor em um meio periódico com múltiplas escalas é dada pelas equações (3.14) a (3.17). O espaço de funções apropriado (CIORANESCU e DONATO, 1999) para se trabalhar no caso de contato térmico perfeito – eq. (3.16) – e condições de contorno de Dirichlet – eq. (3.17) – é  $X(\Omega) = \{w \mid w \in H_0^1(\Omega), [w]_{\Gamma_s} = 0\}$ .

Multiplicando a equação (3.14) por uma função teste  $v \in X(\Omega)$ , integrando em  $\Omega$  e usando a primeira forma do Teorema de Green, obtém-se (MACHADO, 2000)

$$\int_{\Omega} k \frac{\partial T}{\partial x_j} \frac{\partial v}{\partial x_i} d\mathbf{x} - \int_{\Gamma_s \cup \partial\Omega} vk \frac{\partial T}{\partial x_j} n_i ds = \int_{\Omega} v \dot{g} d\mathbf{x} \quad \forall v \in X(\Omega). \quad (4.1)$$

Considerando o espaço  $X(\Omega)$  e aplicando a condição de contorno de fluxo de calor, eq. (3.15), para cada fase, chegamos à desejada forma fraca do problema global com múltiplas escalas

$$\int_{\Omega} k \frac{\partial T}{\partial x_j} \frac{\partial v}{\partial x_i} d\mathbf{x} = \int_{\Omega} v \dot{g} d\mathbf{x} \quad \forall v \in X(\Omega). \quad (4.2)$$

Agora, precisamos propor as seguintes expansões assintóticas com múltiplas escalas

$$T_{\varepsilon}(\mathbf{x}) = T_0(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) + \varepsilon T_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) + \varepsilon^2 T_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) + \dots \text{ e} \quad (4.3)$$

$$v(\mathbf{x}) = v_0(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) + \varepsilon v_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) + \varepsilon^2 v_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) + \dots, \quad (4.4)$$

onde as funções  $T_i$  e  $v_i$ ,  $i = 0, 1, 2 \dots$  são  $Y \times Z$ -Periódicas. O operador  $\frac{\partial}{\partial x_i}$  para uma função  $s = \hat{s}(\mathbf{x}) = \tilde{s}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$  é então determinado usando a regra da cadeia,

$$\frac{\partial}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial y_j} + \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\partial}{\partial z_j}. \quad (4.5)$$

Aplicando a equação (4.5) à eq. (4.2) e substituindo as expressões (4.3) e (4.4), obtemos

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} k \left( \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial y_j} + \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\partial}{\partial z_j} \right) (T_0 + \varepsilon T_1 + \varepsilon^2 T_2) \left( \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial y_i} + \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\partial}{\partial z_i} \right) (v_0 \\ + \varepsilon v_1 + \varepsilon^2 v_2) d\mathbf{x} = \int_{\Omega} v \dot{g} d\mathbf{x} \quad \text{em } \forall v \in X(\Omega). \end{aligned} \quad (4.6)$$

Após procedimentos semelhantes aos desenvolvidos na seção 3.4 e que estão explicitados em (CRUZ e CASTILLERO, 2016), chegamos à forma fraca do primeiro problema de célula (3.73, 3.77, 3.105 e 3.100.2) e do segundo (3.89, 3.100, 3.106 e 3.109). Esses problemas (seção 4.1.1 e 4.1.2) devem ser resolvidos para a solução da homogeneização reiterada.

#### 4.1.1 Forma fraca do primeiro problema local

O primeiro problema local, resolvido na microescala  $Z$ , é apresentado da seguinte maneira:

Dado  $k(\mathbf{y}, \mathbf{z})$ , para cada  $\mathbf{y} \in Y$ , encontre a família paramétrica de funções  $Z$ -periódicas  $\chi_y^j(\mathbf{z}) \in X^\#(Z)$  tal que<sup>3</sup>

$$\int_Z k \frac{\partial \chi_y^j(\mathbf{z})}{\partial z_l} \frac{\partial v}{\partial z_i} d\mathbf{z} = \int_Z k \frac{\partial v}{\partial z_i} d\mathbf{z} \quad \forall v \in X^\#(Z). \quad (4.7)$$

Neste menor nível, a célula periódica em  $Z$ , o espaço de funções  $X^\#(Z) = \{w \mid w \in H_\#^1(Z), [w]_{\Gamma_z} = 0\}$  atende às condições de contorno periódicas (sobrescrito #). Para impor unicidade, também se requer que

$$\int_Z \chi_y^j(\mathbf{z}) d\mathbf{z} = 0. \quad (4.8)$$

A condutividade térmica efetiva intermediária será dada por

$$k^1(\mathbf{y}) = \frac{1}{|Z|} \int_Z \left( k - k \frac{\partial \chi_y^j(\mathbf{z})}{\partial z_l} \right) d\mathbf{z}. \quad (4.9)$$

#### 4.1.2 Forma fraca do segundo problema local

Já o segundo problema local, resolvido na escala  $\mathbf{y}$ , é apresentado da seguinte maneira:

Dado  $k^1(\mathbf{y})$ , encontre  $\chi^j(\mathbf{y}) \in X^\#(Y)$  tal que

$$\int_Y k^1 \frac{\partial \chi^j}{\partial y_l} \frac{\partial v}{\partial y_i} d\mathbf{y} = \int_Y k^1 \frac{\partial v}{\partial y_i} d\mathbf{y} \quad \forall v \in X^\#(Y). \quad (4.10)$$

---

<sup>3</sup> A partir daqui, ficamos restritos à condição que os componentes são materiais isotrópicos, ou seja, que  $k_{i,j}$  é igual a uma constante  $k_c$  para o material contínuo e a uma constante  $k_d$  para o descontínuo.

Agora, no nível intermediário, a célula periódica em  $Y$ , o espaço de funções  $X^\#(Y) = \{w \mid w \in H_\#^1(Y), [w]_{\Gamma_Y} = 0\}$  atende às condições de contorno periódicas. Para impor unicidade, também se requer que

$$\int_Y \chi^j(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = 0. \quad (4.11)$$

Finalmente, a condutividade térmica efetiva será dada por

$$\hat{k} = \frac{1}{|Y|} \int_Y \left( k^1 - k^1 \frac{\partial \chi^j(\mathbf{y})}{\partial y_l} \right) d\mathbf{y}. \quad (4.12)$$

#### 4.2 Elementos finitos na solução de um problema modelo

A partir de agora, trataremos do método dos elementos finitos para que possamos cumprir o objetivo de, usando essa ferramenta matemática, calcular a condutividade térmica efetiva de meios heterogêneos de múltiplas escalas. Esse método tem a vantagem de possuir suficiente flexibilidade geométrica, necessária para a solução do problema de célula com a qual obteremos a condutividade térmica efetiva desejada.

##### 4.2.1 Problema modelo a ser solucionado

Observando as equações (4.7 – 4.9) e (4.10 – 4.12), percebemos que os problemas de valor de contorno que devem ser resolvidos para obter a condutividade térmica intermediária  $k^1$  e, em seguida, os que devem ser resolvidos para obter a condutividade térmica efetiva  $\hat{k}$  possuem estrutura semelhante. Por isso, definimos agora como é o formato do problema que vamos resolver. Esse mesmo modelo também pode ser usado para resolver o problema da homogeneização convencional.

O modelo do problema de célula que devemos resolver é

$$\int_{\Omega_{sc}} \alpha \frac{\partial \Psi}{\partial \eta_p} \frac{\partial v}{\partial \eta_p} d\boldsymbol{\eta} = \int_{\Omega_{sc}} \alpha \frac{\partial v}{\partial \eta_p} d\boldsymbol{\eta} \quad \forall v \in H. \quad (4.13)$$

Em (4.13),  $\alpha$ ,  $\Psi$ ,  $\eta$  e  $H$  variam dependendo se estamos resolvendo um caso de homogeneização convencional, do primeiro problema de célula da homogeneização reiterada ou do segundo problema de célula da homogeneização reiterada, conforme apresenta a tabela 4.1.

Uma vez resolvido o problema de célula (4.13), a função  $\psi$  é conhecida e deve ser substituída em

$$k_H = \frac{1}{|\Omega_{sc}|} \int_{\Omega_{sc}} \alpha \left( 1 - \frac{d\Psi}{d\eta_j} \right) d\eta, \quad (4.14)$$

para obter, dessa forma, o valor da condutividade efetiva do meio na direção  $j$ .

Tabela 4.1 Significa de  $\alpha$ ,  $\Psi$ ,  $\eta$ ,  $H$  e  $k_H$  dependendo do problema a ser resolvido.

	<b>Homogeneização convencional</b>	<b>Primeiro problema de célula (homogeneização reiterada)</b>	<b>Segundo problema de célula (homogeneização reiterada)</b>
$\alpha$	$k$	$k$	$k^1$
$\Psi$	$\chi$	$\chi_y^j$	$\chi^j$
$\eta$	$y$	$z$	$y$
$H$	$X^\#(Y)$	$X^\#(Y)$	$X^\#(Z)$
$k_H$	$k_{eff}$	$k^1$	$\hat{k}$

#### 4.2.2 O método dos elementos finitos

Existem basicamente dois passos na metodologia dos elementos finitos: discretização da forma fraca variacional e solução do sistema discreto de equações algébricas resultante. Neste trabalho, a discretização da forma fraca variacional é feita com o uso de elementos finitos triangulares de primeira ordem ou lineares (Apêndice A).

Podemos reescrever o problema de célula (4.13) por

$$a(\psi, v) = l(v) \quad \forall v \in H, \quad (4.15)$$

onde a forma bilinear  $a(.,.)$  é um operador simétrico positivo-definido. A discretização de (4.15) prevê a projeção do espaço de dimensão finita  $H$  em um subespaço de dimensão finita  $H_h \subset H$ . Supondo que a geração da malha subdivide o domínio  $H$  em  $ng$  elementos triangulares, definidos por  $ng$  nós globais, tal que  $\Omega_{sc} \approx U_{i=1}^{nel} \Omega_{sc}^i$ ,  $H_h$  pode ser definido como

$$H_h = \{v | (\Omega_{sc}^i \in P_1(\Omega_{sc}^i))\} \cap H, \quad (4.16)$$

onde  $P_1(\Omega_{sc}^i)$  é o espaço de todos os polinômios de grau 1 definidos sobre o elemento triangular  $\Omega_{sc}^i$ . Então, a forma discreta correspondente a (4.15) se torna:

Encontrar  $\chi_h \in Y_h(\Omega_{sc,h})$ , tal que

$$a(\psi_h, v) = l(v) \quad \forall v \in H_h, \quad (4.17)$$

onde  $H_h = U_{n=1}^{nel} \Omega_{sc}^n$ .

Um conjunto de interpoladores Lagrangeanos é a base do espaço  $H_h$ , ou seja,  $H_h = span(\phi_i, i = 1, \dots, ng)$ . Definimos então interpoladores lineares, as funções de forma, que são construídas localmente em nível elementar. Utilizando o método de Galerkin para prever a expansão da solução  $\psi_h$  e da função teste  $v$  a partir das funções de base, obtemos

$$\psi_h(\mathbf{\eta}) = \sum_{i=1}^{ng} \psi_{h_i} N_i(\mathbf{\eta}), \quad (4.18)$$

$$v(\mathbf{\eta}) = \sum_{i=1}^{ng} v_i N_i(\mathbf{\eta}). \quad (4.19)$$

As equações (4.18) e (4.19) são aplicadas em (4.17), resultando em

$$v_i A_{ij} \psi_{h_j} = v_i f_i \quad \forall v \in H_h(\Omega_{sc,h}), \quad (4.20)$$

onde  $A_{ij}$  e  $v_i$  são

$$A_{ij} = \int_{\Omega_{sc}} \frac{\partial N_i}{\partial \eta_p} \frac{\partial N_j}{\partial \eta_p} d\mathbf{y}, \quad (4.21)$$

$$f_i = \int_{\Omega_{sc}} \frac{\partial N_i}{\partial \eta_p} d\mathbf{y}. \quad (4.22)$$

Finalmente chegamos então ao sistema discreto de equações algébricas

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\Psi}_h = \mathbf{f}, \quad (4.23)$$

onde  $\mathbf{A} = A_{ij} = a(N_i, N_j)$ ,  $i, j = 1, \dots, ng$  é a matriz de rigidez ou Laplaciano discreto do sistema,  $\mathbf{f} = f_i = l(N_i)$ ,  $i = 1, \dots, ng$  é o vetor de forças correspondente à heterogeneidade de (4.23) e  $\boldsymbol{\Psi}_h$  é o vetor solução. A maneira como devemos calcular  $\mathbf{A}$  e  $\mathbf{f}$  para elementos finitos triangulares está apresentada no Apêndice A.

Nós não construímos a matriz rigidez  $\mathbf{A}$ , mas utilizamos uma abordagem conhecida como elemento-por-elemento, na qual temos *nel* matrizes de rigidez, uma para cada elemento. Uma explicação deste método pode ser encontrada em (MACHADO, 2000).

#### 4.3 Método dos Gradientes Conjugados

A condição de periodicidade da solução  $\psi$  é imposta de forma discreta no processo iterativo na matriz  $\mathbf{A}$  e na matriz  $\mathbf{f}$  através da identificação de pares de nós correspondentes sobre arestas periódicas como um único grau de liberdade do sistema (Figura 4.1).

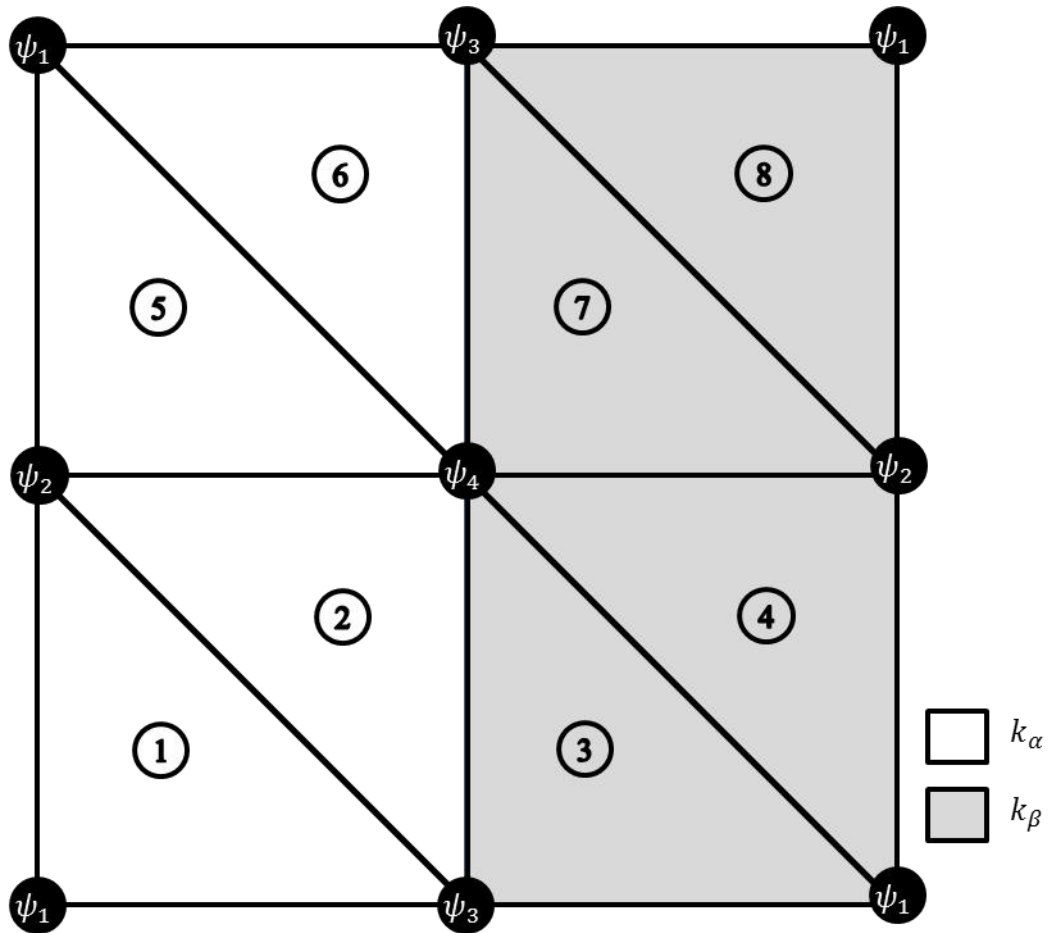


Figura 4.1 Ilustração de uma malha de elementos finitos triangulares lineares: Valores de  $\psi$  que estão na fronteira e no mesmo nível, na direção vertical ou horizontal, devem ser iguais.

Para que essa condição de periodicidade seja imposta, o sistema de equações algébricas (4.23) será resolvido pelo método dos gradientes conjugados, um algoritmo de soluções iterativas adequado para a solução de sistemas com matrizes simétricas e positivas-definidas (Strang, 1973). O algoritmo dos gradientes conjugados sem pré-condicionamento tem a seguinte forma (Schewchuk, 1994)



$$\begin{aligned}
&\text{inicialização: } it \leftarrow 0, \mathbf{r}^0 \leftarrow \mathbf{f} - \mathbf{A}\boldsymbol{\psi}_h^0, \mathbf{d} \leftarrow \mathbf{r}, \delta_{new} \leftarrow \mathbf{r}^T \mathbf{r}, \delta_0 \leftarrow \delta_{new} \\
&\text{Enquanto } \delta_{new} \geq \epsilon^2 \delta_0 \text{ e } it < 10000 \\
&\quad \mathbf{Q} \leftarrow \mathbf{A}\mathbf{d} \\
&\quad \mu \leftarrow \frac{\delta_{new}}{\mathbf{d}^T \mathbf{Q}} \\
&\quad \boldsymbol{\psi}_h \leftarrow \boldsymbol{\psi}_h + \mu \mathbf{d} \\
&\quad \text{se } it \text{ é divisível por } 50, \\
&\quad \quad \mathbf{r} \leftarrow \mathbf{f} - \mathbf{A}\boldsymbol{\psi}_h \\
&\quad \quad \text{se não,} \\
&\quad \quad \mathbf{r} \leftarrow \mathbf{r} - \mu \mathbf{Q} \\
&\quad \quad \delta_{old} \leftarrow \delta_{new} \\
&\quad \quad \delta_{new} \leftarrow \mathbf{r}^T \mathbf{r} \\
&\quad \quad \mathbf{d} \leftarrow \mathbf{r} + \nu \mathbf{d} \\
&\quad it = it + 1
\end{aligned} \tag{4.24}$$

onde  $it$  é o número da iteração,  $\mathbf{r}$  é o vetor dos resíduos,  $\mathbf{d}$  é o vetor da direção de busca,  $\mathbf{Q}$  é um vetor intermediário,  $T$  é o símbolo da operação de transposição,  $\mu$  e  $\nu$  são quantidades escalares,  $\delta$  (escalar) é a norma do vetor dos resíduos e  $\epsilon$  é uma tolerância prescrita para o critério de parada da iteração. Arbitrou-se que  $\epsilon$  é igual a  $10^{-3}$  e que, a cada 50 iterações, o resíduo seja recalculado a partir de sua definição, buscando assim reduzir os erros de aritmética de ponto flutuante. O processo iterativo (4.24) termina quando  $\|\mathbf{r}\| \leq \epsilon \|\mathbf{r}^0\|$  ou quando  $it$  for maior que 10000, já que consideramos que dez mil iterações são suficientes para chegar ao resultado desejado. Neste trabalho, conseguimos resolver os sistemas de equações algébricas lineares com uma boa performance sem implementar pré-condicionamento no método dos gradientes conjugados. Em trabalhos futuros, quando implementarmos geometrias tridimensionais, começaremos a usar pré-condicionamento.

Já a condição de unicidade da solução contínua  $\psi$  é imposta discretamente forçando-se média zero no vetor solução,

$$\sum_{i=1}^{ng} \psi_{h_i} = 0. \tag{4.25}$$

#### 4.4 Métodos Para Calcular a Condutividade Térmica Efetiva

Para finalmente obtermos a condutividade térmica efetiva de um composto, devemos resolver a integral na equação (4.14). Essa equação pode reescrita como

$$k_H = \frac{1}{|\Omega_{sc}|} \int_{\Omega_{sc}} \alpha d\mathbf{\eta} - \frac{1}{|\Omega_{sc}|} \int_{\Omega_{sc}} \alpha \frac{d\psi_h}{d\eta_j} d\mathbf{\eta}. \quad (4.26)$$

Como  $\alpha$  é uma constante para cada fase, a primeira integral pode ser dividida para cada domínio e resolvida de maneira direta:

$$\int_{\Omega_{sc}} \alpha d\mathbf{\eta} = \int_{\Omega_c} d\mathbf{\eta} + \alpha^* \int_{\Omega_d} d\mathbf{\eta} = \sum_{i=1}^{nel_c} A_{el}^i + \alpha^* \sum_{i=1}^{nel_d} A_{el}^i, \quad (4.27)$$

onde  $\alpha^*$  é igual ao parâmetro  $\alpha$  parametrizado pela condutividade térmica do material contínuo,  $\alpha^* = \alpha/k_c$ ,  $A_{el}^i$  é a área do elemento  $i$  e  $nel_c$  e  $nel_d$  são o número de elementos no domínio do meio contínuo e do meio descontínuo, respectivamente. Já a segunda integral em (4.26) requer uma maior atenção, porque seu integrando não é constante. A seguir, analisaremos os desvios numéricos inerentes a três maneiras possíveis de calcular essa integração para escolhermos a mais adequada e realizarmos os cálculos dos resultados deste trabalho.

##### 4.4.1 Método da Quadratura Analítica

Derivando a equação (4.18), obtemos

$$\frac{d\psi_{hi}}{d\eta_j} = \psi_{hi} \sum_{i=1}^{ng} \frac{dN_i(\mathbf{\eta})}{d\eta_j}. \quad (4.28)$$

Agora, podemos usar (4.28) para calcular a segunda integral de (4.26)

$$\int_{\Omega_{sc}} \alpha \frac{d\psi_h}{d\eta_j} d\boldsymbol{\eta} = \psi_{hi} \sum_{i=1}^{ng} \frac{dN_i(\boldsymbol{\eta})}{d\eta_j} \int_{\Omega_{sc}} \alpha d\boldsymbol{\eta}. \quad (4.29)$$

Para resolver a equação (4.26), substituiremos o valor das funções de forma para os elementos finitos lineares triangulares em (4.29) e realizaremos os somatórios. Assim, a condutividade térmica efetiva calculada através da quadratura analítica ( $\hat{k}_{QA}$ ) será dada por

$$\begin{aligned} \hat{k}_{QA} = \frac{1}{|\Omega_{sc}|} & \left[ \sum_{i=1}^{nel_c} A_{el}^i + \alpha^* \sum_{i=1}^{nel_d} A_{el}^i + \sum_{i=1}^{nel_c} A_{el}^i \psi_{hi} \sum_{i=1}^{ng} \frac{dN_i(\boldsymbol{\eta})}{d\eta_j} \right. \\ & \left. + \alpha^* \sum_{i=1}^{nel_d} A_{el}^i \psi_{hi} \sum_{i=1}^{ng} \frac{dN_i(\boldsymbol{\eta})}{d\eta_j} \right]. \end{aligned} \quad (4.30)$$

#### 4.4.2 Método da Norma de Energia

Analisaremos agora outro método para resolver a equação (4.26). Se a equação (4.13) é válida para qualquer  $v$ , ela também é válida para  $v = \psi$ ,

$$\int_{\Omega_{sc}} \alpha \frac{\partial \psi}{\partial \eta_p} \frac{\partial \psi}{\partial \eta_p} d\boldsymbol{\eta} = \int_{\Omega_{sc}} \alpha \frac{\partial \psi}{\partial \eta_p} d\boldsymbol{\eta}. \quad (4.31)$$

Com isso, aplicando a norma de energia obtemos

$$\int_{\Omega_{sc}} \alpha \frac{\partial \psi}{\partial \eta_p} \frac{\partial \psi}{\partial \eta_p} d\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\Psi}_h^{-1} \mathbf{A} \boldsymbol{\Psi}_h. \quad (4.32)$$

onde  $\boldsymbol{\Psi}_h^{-1} \cdot \mathbf{A} \boldsymbol{\Psi}_h$  é um produto escalar. Substituindo (4.32) em (4.26), chegamos à expressão que calcula a condutividade térmica efetiva usando a norma de energia ( $\hat{k}_{NE}$ ),

$$\hat{k}_{NE} = \frac{1}{|\Omega_{sc}|} \int_{\Omega_{sc}} \alpha d\boldsymbol{\eta} - \frac{1}{|\Omega_{sc}|} \boldsymbol{\Psi}_h^{-1} \mathbf{A} \boldsymbol{\Psi}_h. \quad (4.33)$$

#### 4.4.3 Método da Quadratura de Gauss

Finalmente, o terceiro método que iremos programar a fim de calcular a condutividade térmica efetiva utiliza a quadratura gaussiana. Como exposto no Apêndice B, a fórmula geral usada para calcular numericamente integrais através desse método é

$$\iint_T F dr ds = \sum_{i=1}^{NNG} A_{el}^i w_i F(r_i, s_i), \quad (4.34)$$

onde  $NNG$  é o Número de Nós de Gauss,  $w_i$  é o peso e  $r_i$  e  $s_i$  são as coordenadas dos pontos onde a função  $F$  será avaliada. Podemos usar (4.34) para resolver as duas integrais da equação (4.26) e obter  $\hat{k}_{QG}$  ( $\hat{k}$  obtida por quadratura de Gauss). Para a primeira integral  $F$  igual a 1 e, para a segunda,  $F$  igual a  $\frac{\partial \psi}{\partial \eta_p}$ , que, como na seção 4.3.1, será calculado usando as funções de forma (4.28).

#### 4.5 Algoritmo de cálculo

Fazemos agora um algoritmo de cálculo para resolver a homogeneização convencional e a reiterada.

##### 4.4.1 Homogeneização convencional

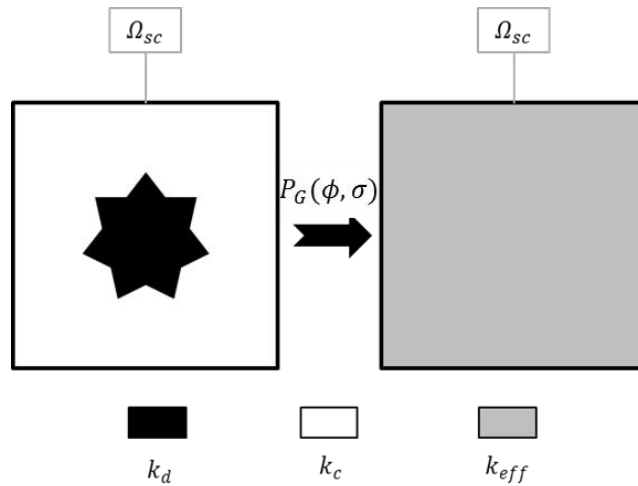


Figura 4.2 Esquema da homogeneização convencional.

- Procedimento  $P$  (figura 4.2)

Passo 1- Definimos o problema de célula que desejamos resolver, especificando

- a razão entre a condutividade do material descontínuo e do contínuo,  $\sigma$
- a fração de área ocupada pelo material descontínuo,  $\phi$
- a geometria da microestrutura,  $G$ .

Passo 2- Resolvemos a equação (4.13) na célula  $\Omega_{sc}$

Passo 3- Uma vez obtido, em 2, os valores de  $\Psi$  nos nós, usamos (4.14) para obter o valor da condutividade térmica efetiva do material

#### 4.4.1 Homogeneização reiterada

Para resolvermos um problema de homogeneização reiterada, os seguintes passos devem ser seguidos (figura 4.3).

- (a) Para resolvermos o primeiro problema de célula, resolvemos todos os passos do procedimento  $P$  da homogeneização convencional para a célula da menor escala,
- (b) Em seguida, para resolvermos o segundo problema de célula, resolvemos novamente todos os passos do procedimento  $P$ , mas agora para a célula da escala intermediária.

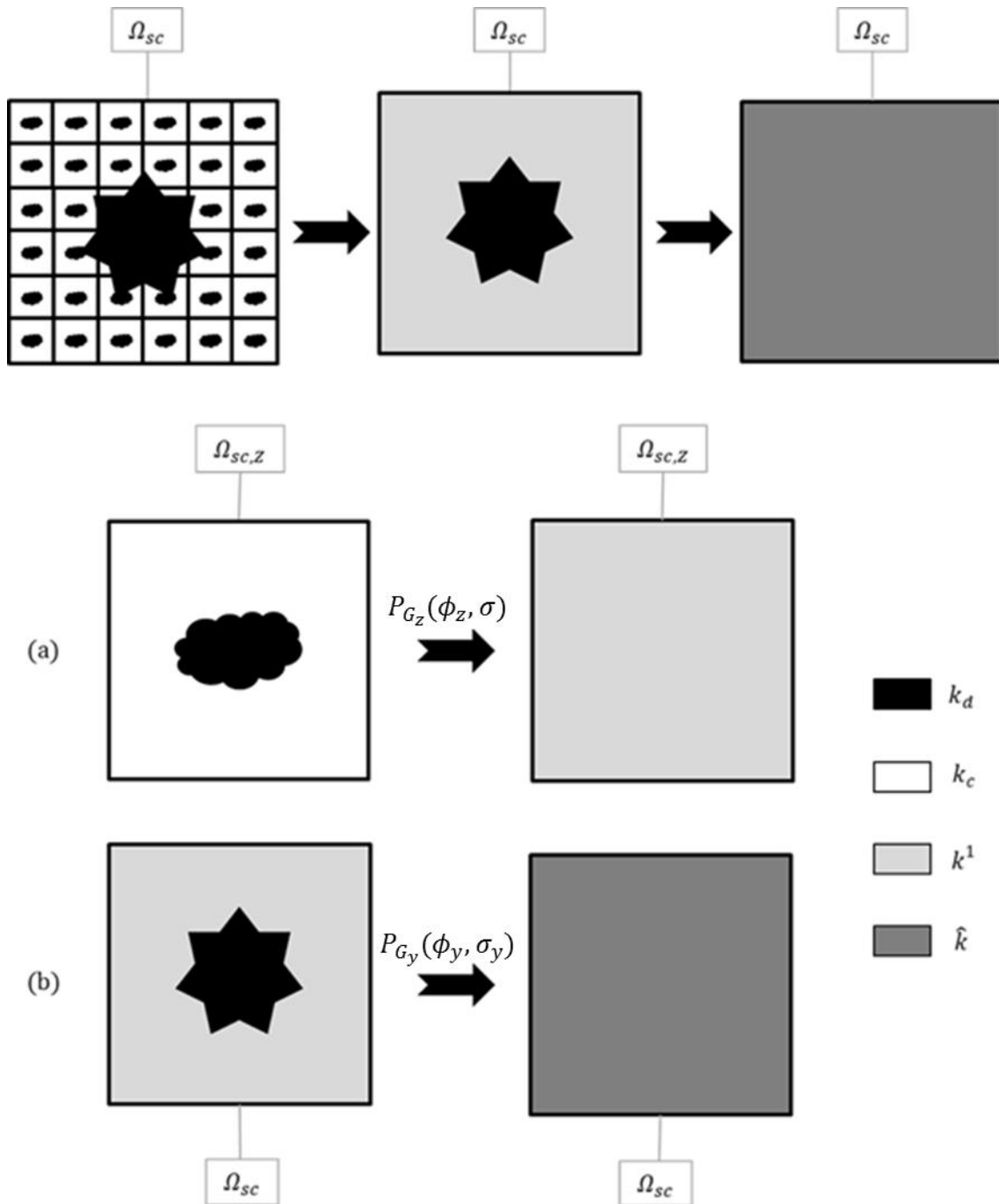


Figura 4.3 Esquema da homogeneização reiterada.

## 5 VALIDAÇÃO E RESULTADOS

Nesta seção, apresentaremos os resultados obtidos com a formulação e os métodos numéricos apresentados. Primeiramente, para validação do modelo analítico-numérico e do código desenvolvido de homogeneização reiterada, resolveremos casos mais simples, pois possuem solução analítica que pode ser comparada ao resultado numérico encontrado a fim de validá-lo. Em seguida, calcularemos, usando o modelo desenvolvido, a condutividade térmica efetiva em microestruturas mais complexas.

### 5.1 Validação

Para cada caso proposto, calcularemos a condutividade térmica das três diferentes maneiras apresentadas (pela quadratura analítica, pelo método da norma de energia e pela quadratura gaussiana) e para malhas com graus de refinamento diferentes, para avaliar a influência do refinamento na malha e a qualidade do resultado obtido.

Como são métodos numéricos, os resultados encontrados irão possuir algum desvio em relação ao resultado analítico. Calcularemos esses desvios relativos utilizando a equação (5.1),

$$\Delta_x^{QA/NE/QG} = \frac{|\hat{k}_x^{Analítico} - \hat{k}_x^{QA/NE/QG}|}{\hat{k}_x^{Analítico}}, \quad (5.1)$$

onde o sobrescrito “*Analítico*” indica que é um dado disponível na literatura ou *QA/NE/QG* indicam o método numérico pelo qual o valor foi calculado. Já o subscrito *x* indica a direção na qual ele foi obtido.

Assim, poderemos comparar os valores obtidos através do método desenvolvido e validá-lo.

### 5.1.1 Compósitos Bilaminados

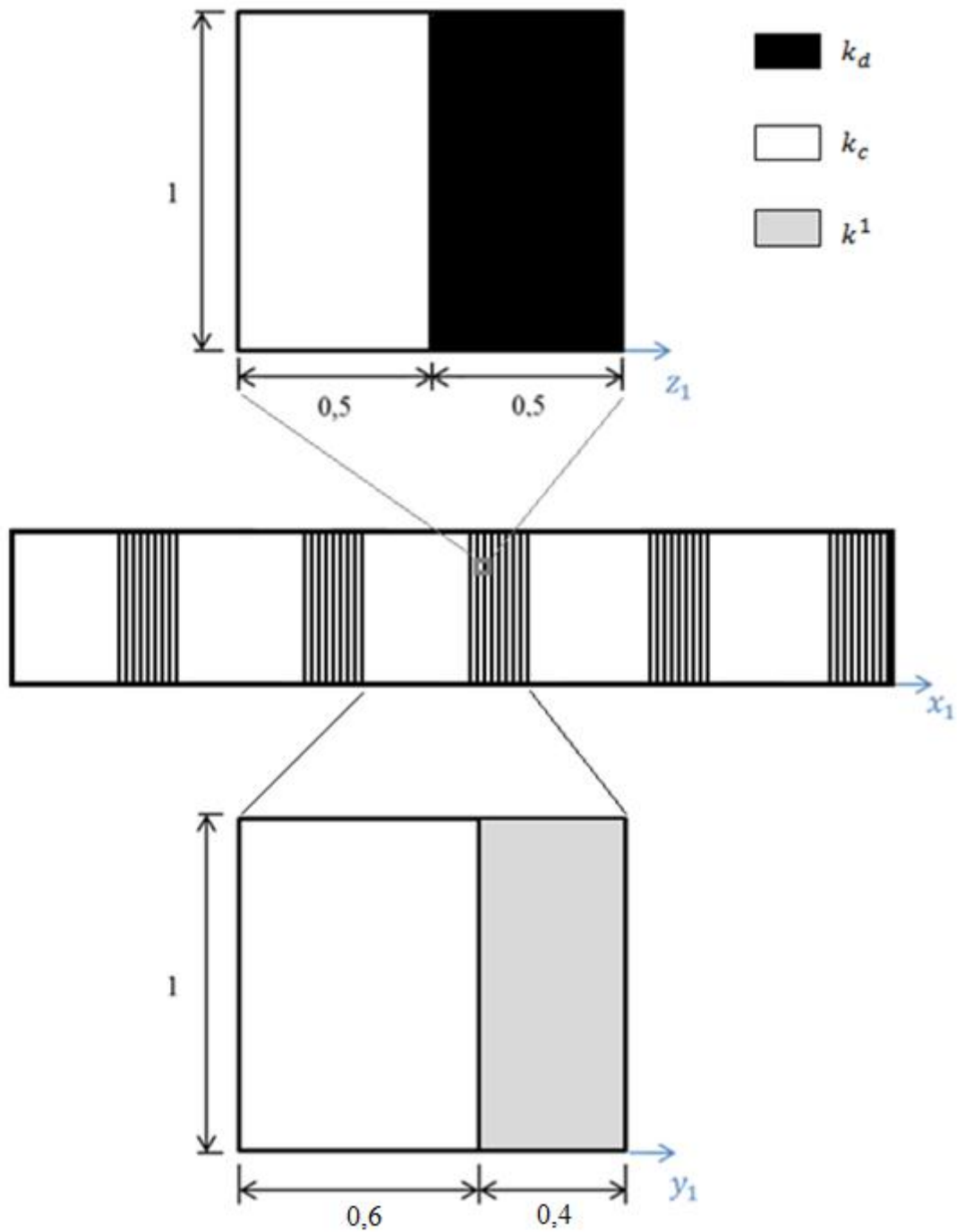


Figura 5.1 Esquema de um compósito bilaminado com três escalas usado caso de validação do código desenvolvido de homogeneização reiterada. Para esse compósito,  $\phi_z = 0,5$  e  $\phi_y = 0,4$ .

Vamos começar analisando a condutividade térmica efetiva de compósitos bilaminados, como a estrutura representada na Figura 5.1. Tomaremos como caso de validação o material bilaminado porque podemos aplicar o código de homogeneização



reiterada desenvolvido e comparar com a solução analítica, para assim validar nosso código. Em (AURIAULT, 1983), o autor obtém a solução analítica da condutividade térmica efetiva para esta estrutura usando a homogeneização reiterada. Para materiais isotrópicos, os seguintes resultados são obtidos para a condutividade térmica efetiva na direção  $x_1$ ,  $\hat{k}_1^{Analítico}$ , e para a direção  $x_2$ ,  $\hat{k}_2^{Analítico}$ , em função da fração de material descontinuo,  $\phi$ , e da razão entre as condutividades térmicas,  $\sigma$ ,

$$\hat{k}_1^{Analítico}(\phi, \sigma) = \frac{\sigma}{\sigma(1 - \phi) + \phi} \quad (5.2)$$

$$\hat{k}_2^{Analítico}(\phi, \sigma) = 1 - \phi + \sigma\phi. \quad (5.3)$$

O resultado obtido de (5.2) e (5.3) é adimensional, já que ele está parametrizado em relação à condutividade térmica do material contínuo.

a) Condutividade efetiva do nível Z

Começamos calculando a condutividade térmica efetiva do menor nível da microestrutura, o nível Z. Usamos a lei das misturas (5.2 e 5.3) para calculá-la:

$$k_{z_1}^{1,Analítico} \left( \frac{1}{2}, 2 \right) = \frac{4}{3} \quad (5.4)$$

$$k_{z_2}^{1,Analítico} \left( \frac{1}{2}, 2 \right) = 1,5. \quad (5.5)$$

Agora, resolvemos o modelo analítico-numérico desenvolvido ao longo desta dissertação em malhas de diferentes espaçamentos,  $h$ , como apresentado na figura 5.2. Isso será feito para que possamos avaliar a influência do refinamento da malha na qualidade do resultado obtido. Este resultado, corresponde ao primeiro problema de célula.

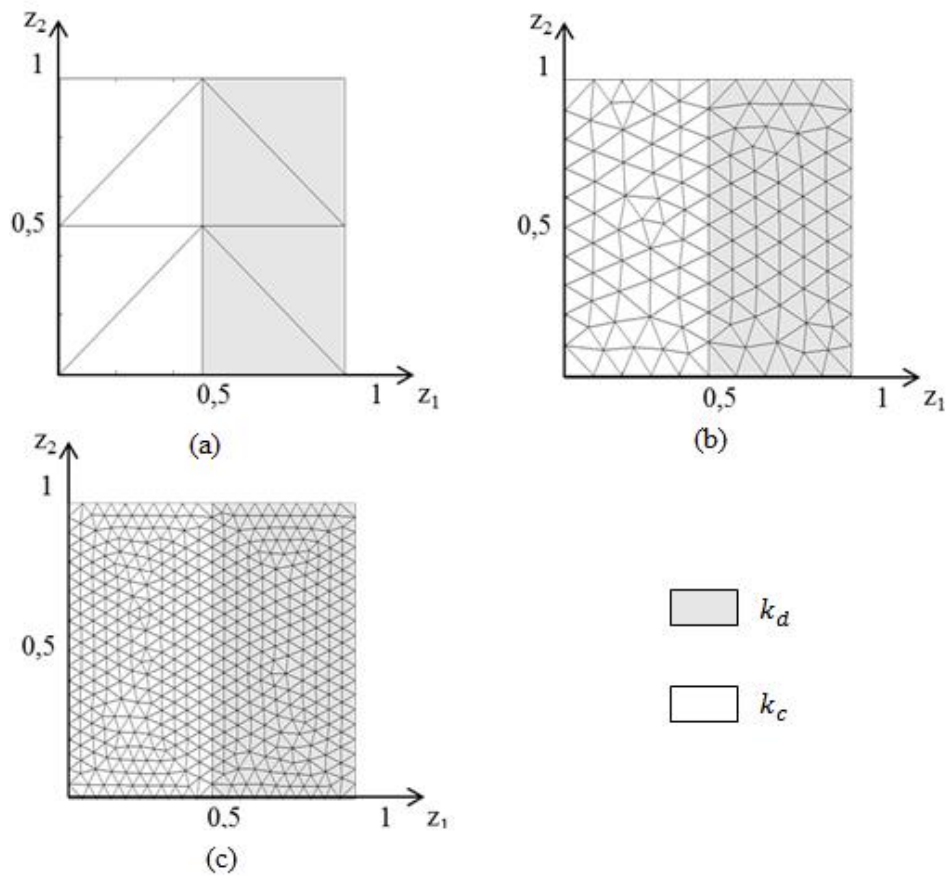


Figura 5.2 Diferentes malhas nas quais obtemos, numericamente, a condutividade térmica analítica do compósito bilaminado da figura 5.1 no nível  $Z$ : (a)  $h=0,50$ , (b)  $h=0,10$ , (c)  $h=0,05$ .

Os desvios dos resultados numéricos obtidos em relação à solução analítica (5.4 e 5.5) estão listados na tabela 5.1. Observamos que o método analítico-numérico desenvolvido foi capaz de nos fornecer o resultado exatamente igual ao analítico, com os três métodos de integração diferentes.

Tabela 5.1 Desvio em relação ao resultado analítico do valor da condutividade térmica efetiva do compósito bilaminado da célula unitária no nível  $Zz$ , figura 5.4. Valores obtidos numericamente com os diferentes métodos numéricos propostos

$h$	0,5	0,1	0,05
$\Delta_{z_1}^{QA}$	8,20E-08	6,40E-08	2,00E-16
$\Delta_{z_2}^{QA}$	1,00E-16	3,00E-16	0,00E+00
$\Delta_{z_1}^{NE}$	8,20E-08	6,40E-08	0,00E+00
$\Delta_{z_2}^{NE}$	3,00E-16	3,00E-16	0,00E+00
$\Delta_{z_1}^{QG}$	8,20E-08	6,40E-08	1,30E-14
$\Delta_{z_2}^{QG}$	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00

b) Condutividade efetiva do nível  $Y$

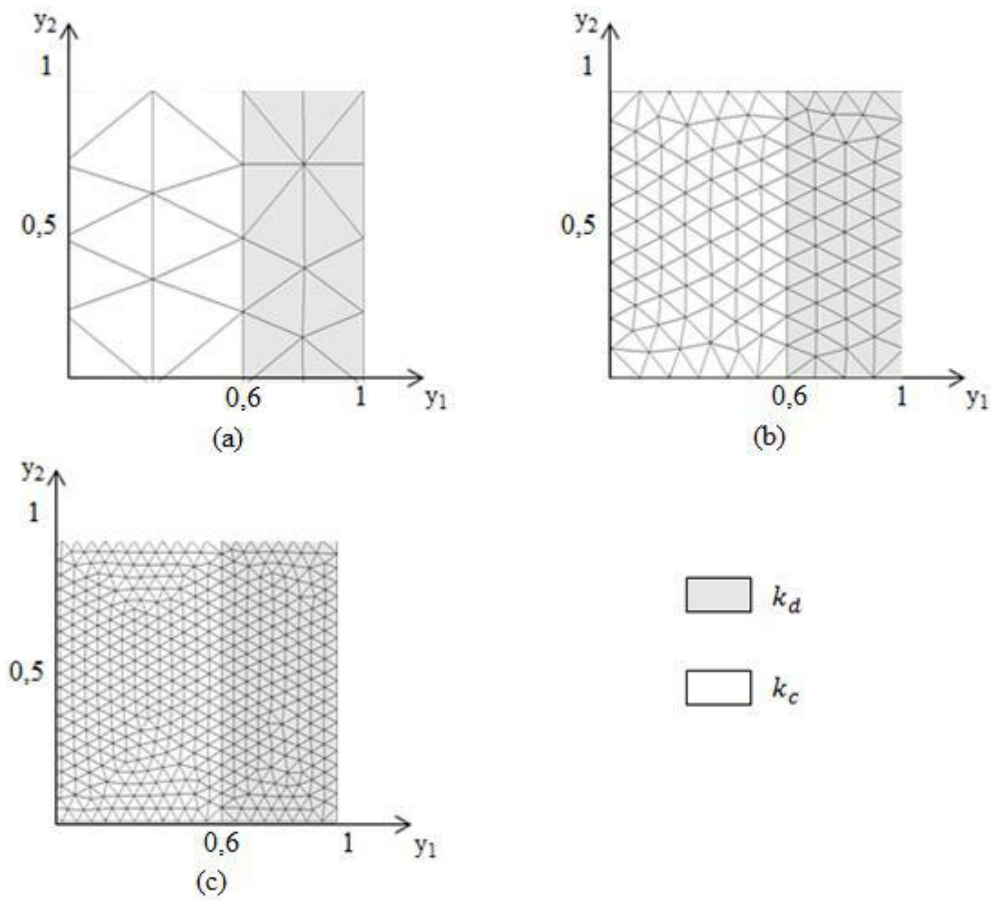


Figura 5.3 Diferentes malhas nas quais obtemos, numericamente, a condutividade térmica analítica do compósito bilaminado da figura 5.1 no nível  $Y$ : (a)  $h=0,25$ , (b)  $h=0,10$ , (c)  $h=0,05$ .

Agora, analisaremos a condutividade térmica efetiva do outro nível da microestrutura, o nível  $Y$ , que é a condutividade térmica efetiva do meio. Usaremos novamente a lei das misturas (5.2 e 5.3) para calculá-la, mas agora o  $\phi_Y$  é igual a 0,4 e o  $\sigma_Y$  vale  $\hat{k}_{z_1}^1$  ou  $\hat{k}_{z_2}^1$ , dependendo da direção na qual a condutividade térmica efetiva está sendo avaliada:

$$\hat{k}_1^{Analítico} \left( \frac{2}{5}, \frac{4}{3} \right) = \frac{10}{9} \quad (5.6)$$

$$\hat{k}_2^{Analítico} \left( \frac{2}{5}, \frac{3}{2} \right) = 1,2. \quad (5.7)$$

Esses resultados também podem ser obtidos numericamente utilizando as malhas da figura 5.3 e o modelo analítico-numérico desenvolvido. Os resultados numéricos possuem desvio relativo em relação aos analíticos listados na tabela 5.2. Novamente, observamos que os desvios, para os três métodos de integração, são exatamente iguais a zero ou iguais a zero na aritmética de ponto flutuante.

Tabela 5.2 Desvio em relação ao resultado analítico do valor da condutividade térmica efetiva do compósito bilaminado da célula unitária no nível  $Y$ , figura 5.3. Valores obtidos numericamente com os diferentes métodos numéricos propostos.

$h$	<b>0,25</b>	<b>0,1</b>	<b>0,05</b>
$\Delta_{y_1}^{QA}$	2,60E-09	1,10E-09	2,90E-09
$\Delta_{y_2}^{QA}$	6,00E-16	2,00E-16	4,00E-16
$\Delta_{y_1}^{NE}$	2,60E-09	1,10E-09	2,90E-09
$\Delta_{y_2}^{NE}$	5,90E-13	2,00E-16	4,00E-16
$\Delta_{y_1}^{QG}$	2,60E-09	1,10E-09	2,90E-09
$\Delta_{y_2}^{QG}$	8,00E-16	0,00E+00	0,00E+00

Ao observar os valores gerados pelo código desenvolvido, percebemos que, para este primeiro caso, conseguimos obter o resultado analítico para todas as três malhas propostas, mesmo para as mais grosseiras. Isto acontece porque a geometria é muito simples, apenas com fronteiras retas entre os materiais, de modo que os elementos triangulares lineares são suficientes para reproduzir a geometria perfeitamente. Os

desvios listados na tabela 5.1 e 5.2 aparecem devido ao erro numérico inerente às operações com pontos flutuantes.

### 5.1.2 Arranjo quadrado de cilindros circulares

Abordamos agora o caso clássico de um arranjo quadrado de cilindros circulares (Figura 1.2). Usamos os resultados obtidos por (MANTEUFEL e TODREAS, 1994) para validar os resultados que obtivemos numericamente. Esses valores são calculados para cinco refinamentos diferentes (figura 5.4). Nesse momento, usamos  $\sigma$  igual a 2 e  $\phi$  igual a 0,7.

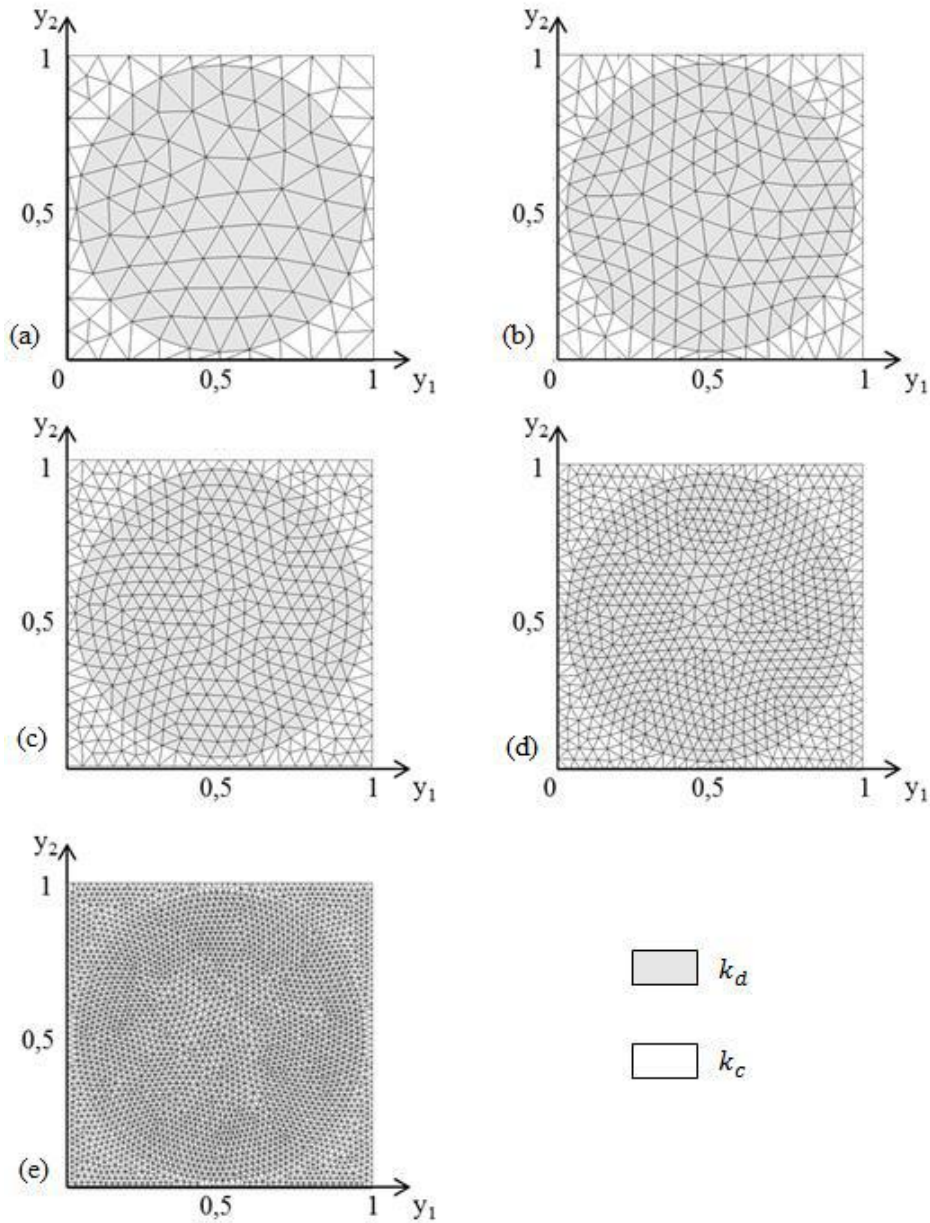


Figura 5.4 Os cinco refinamentos para os quais obtivemos a condutividade térmica efetiva do arranjo quadrado de cilindros circulares, (a)  $h=0,1$ , (b)  $h=0,08$ , (c)  $h=0,05$ , (d)  $h=0,04$  e (e)  $h=0,02$ .

Os resultados obtidos numericamente (tabela 5.4) não foram tão próximos ao resultado analítico quanto os do compósito bilaminado. Esse resultado já era esperado, uma vez que a geometria agora é curva e, neste primeiro trabalho, usamos elementos finitos na forma de triângulos lineares. Também podemos reparar que, à medida que refinamos a malha, os resultados ficam mais próximos aos obtidos por Manteufel e Todreas, o que também já era esperado, uma vez que os erros da geometria tendem a diminuir. Traçamos um gráfico do logaritmo neperiano dos desvios relativos do resultado numérico em função do logaritmo neperiano do refinamento  $h$  (Figura 5.5).

Podemos observar que, à medida que refinamos a malha, o erro melhora linearmente, com inclinação 1:2. Essa é uma característica da função resolvida. Para podermos comparar, refizemos a simulação com outros valores (Figuras 5.6 e 5.7) para a relação entre as condutividades térmicas ( $\sigma$  igual a 2 e  $\sigma$  igual a 50) e relações entre as áreas ( $\phi$  igual a 0,2 e  $\phi$  igual a 0,7).

Nas figuras 5.5 e 5.6, traçamos uma linha com inclinação 1:2 e podemos observar que a melhora do resultado à medida que refinamos a malha está bem próxima à uma paralela a essa linha. Se aumentarmos o valor de  $\sigma$  (figura 5.7), o resultado se distancia do esperado. Acontece porque, com uma maior razão entre a condutividade térmica do material das partículas e do material da matriz, os erros gerados por usarmos uma malha com elementos triangulares lineares para modelar uma geometria curva se tornam mais prejudiciais ao resultado. Os gráficos das figuras 5.5 a 5.7 nos permitem fazer uma análise qualitativa da estabilidade do problema resolvido. Esse aumento na instabilidade verificado quando aumentamos o parâmetro  $\sigma$  também pode ser percebido numericamente pela tabela 5.3, na qual apresentamos o valor da razão espectral da matriz rigidez para os casos analisados.

Como os três métodos para calcular a condutividade térmica efetiva se mostraram eficientes, escolhemos o método da Quadratura de Gauss para obter os resultados numéricos desta dissertação, pois este método será necessário quando, nos trabalhos futuros, começarmos a usar elementos finitos isoparamétricos. Como os materiais considerados são isotrópicos, não há necessidade de calcular a condutividade térmica efetiva na direção 1 e 2. Por isso, a partir da próxima seção, todos os resultados apresentados foram calculados usando o método da Quadratura de Gauss e na direção 1, além de usarmos malhas com um refinamento  $h$  igual a 0,02.

Tabela 5.3 Razão espectral da matriz rigidez em função de  $\sigma$ , de  $\phi$  e do espaçamento de  $h$

$h$	$\sigma = 2, \phi = 0,2$	$\sigma = 50, \phi = 0,2$	$\sigma = 2, \phi = 0,7$
<b>0,02</b>	7,54	188,53	7,67
<b>0,04</b>	7,55	188,83	7,64
<b>0,05</b>	7,51	187,85	8,69
<b>0,08</b>	7,61	190,33	7,57
<b>0,1</b>	7,43	185,86	8,71

Tabela 5.4 Desvio do resultado calculado em relação ao resultado obtido por (MANTEUFEL e TODREAS, 1994) para o valor da condutividade térmica efetiva do arranjo quadrado de cilindros circulares. Valores obtidos com os diferentes métodos numéricos propostos.

$\sigma = 2$					
$\phi = 0,7$					
$h$	0,02	0,04	0,05	0,08	0,1
$\Delta_{y_1}^{QA}$	6,7E-05	2,7E-04	4,2E-04	8,9E-04	1,4E-03
$\Delta_{y_2}^{QA}$	5,2E-05	2,6E-04	4,3E-04	1,0E-03	1,7E-03
$\Delta_{y_1}^{NE}$	6,7E-05	2,7E-04	4,2E-04	8,9E-04	1,4E-03
$\Delta_{y_2}^{NE}$	5,2E-05	2,6E-04	4,3E-04	1,0E-03	1,7E-03
$\Delta_{y_1}^{QG}$	6,7E-05	2,7E-04	4,2E-04	8,9E-04	1,4E-03
$\Delta_{y_2}^{QG}$	5,2E-05	2,6E-04	4,3E-04	1,0E-03	1,7E-03
$\sigma = 2$					
$\phi = 0,2$					
$h$	0,02	0,04	0,05	0,08	0,1
$\Delta_{y_1}^{QA}$	8,6E-05	3,3E-04	6,3E-04	1,3E-03	2,0E-03
$\Delta_{y_2}^{QA}$	8,8E-05	3,4E-04	6,2E-04	1,3E-03	2,1E-03
$\Delta_{y_1}^{NE}$	8,6E-05	3,3E-04	6,3E-04	1,3E-03	2,0E-03
$\Delta_{y_2}^{NE}$	8,8E-05	3,4E-04	6,2E-04	1,3E-03	2,1E-03
$\Delta_{y_1}^{QG}$	8,6E-05	3,3E-04	6,3E-04	1,3E-03	2,0E-03
$\Delta_{y_2}^{QG}$	8,8E-05	3,4E-04	6,2E-04	1,3E-03	2,1E-03
$\sigma = 50$					
$\phi = 0,2$					
$h$	0,02	0,04	0,05	0,08	0,1
$\Delta_{y_1}^{QA}$	7,1E-05	3,1E-04	1,9E-04	1,0E-03	1,9E-03
$\Delta_{y_2}^{QA}$	5,5E-05	2,4E-04	2,2E-04	1,0E-03	1,6E-03
$\Delta_{y_1}^{NE}$	7,1E-05	3,1E-04	1,9E-04	1,0E-03	1,9E-03
$\Delta_{y_2}^{NE}$	5,5E-05	2,4E-04	2,2E-04	1,0E-03	1,6E-03
$\Delta_{y_1}^{QG}$	7,1E-05	3,1E-04	1,9E-04	1,0E-03	1,9E-03
$\Delta_{y_2}^{QG}$	5,5E-05	2,4E-04	2,2E-04	1,0E-03	1,6E-03



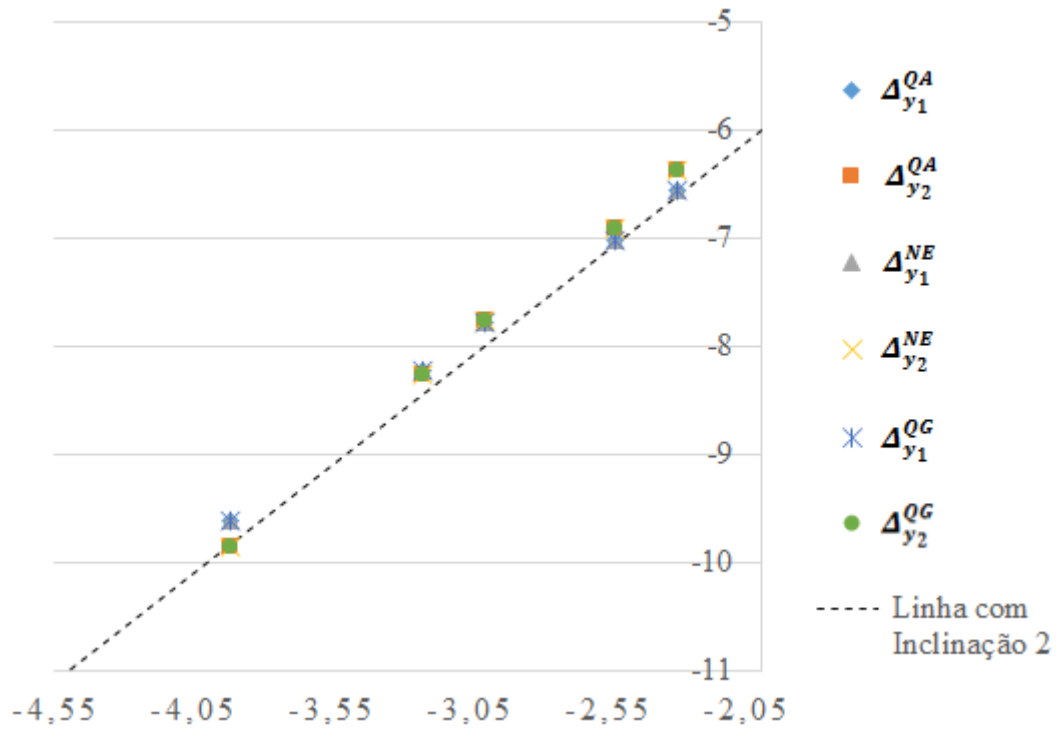


Figura 5.5 Gráfico com o logaritmo do desvio relativo em função do logaritmo do refinamento da malha, para  $\sigma$  igual a 2 e  $\phi$  igual a 0,7.

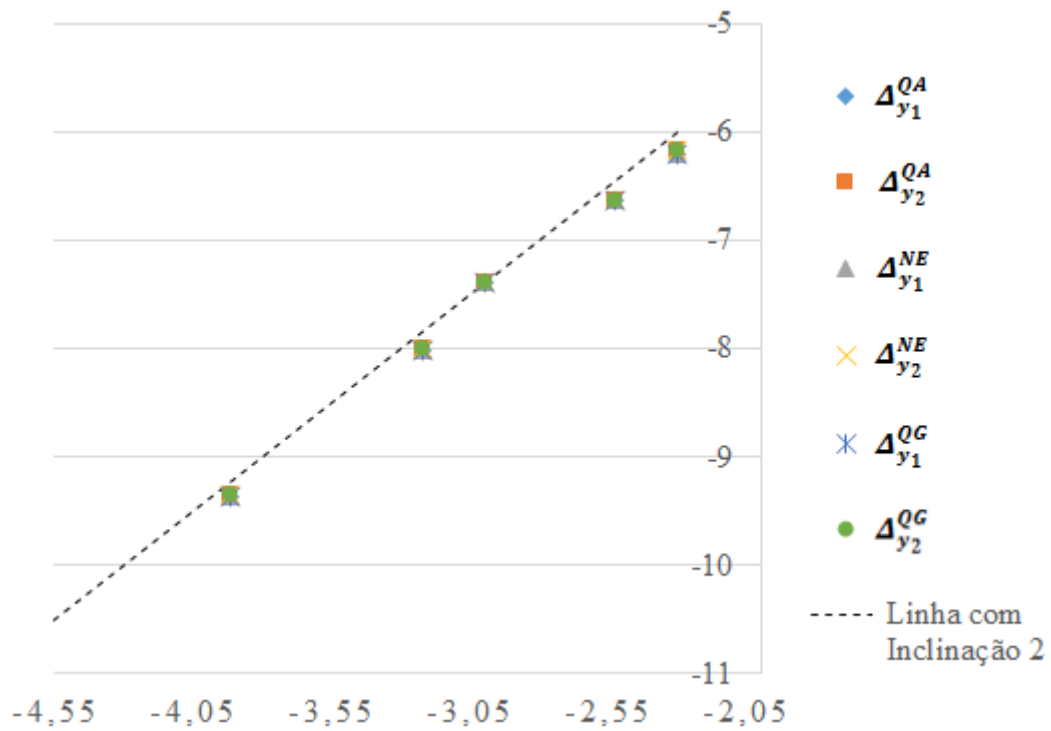


Figura 5.6 Gráfico com o logaritmo do desvio relativo em função do logaritmo do refinamento da malha, para  $\sigma$  igual a 2 e  $\phi$  igual a 0,2.

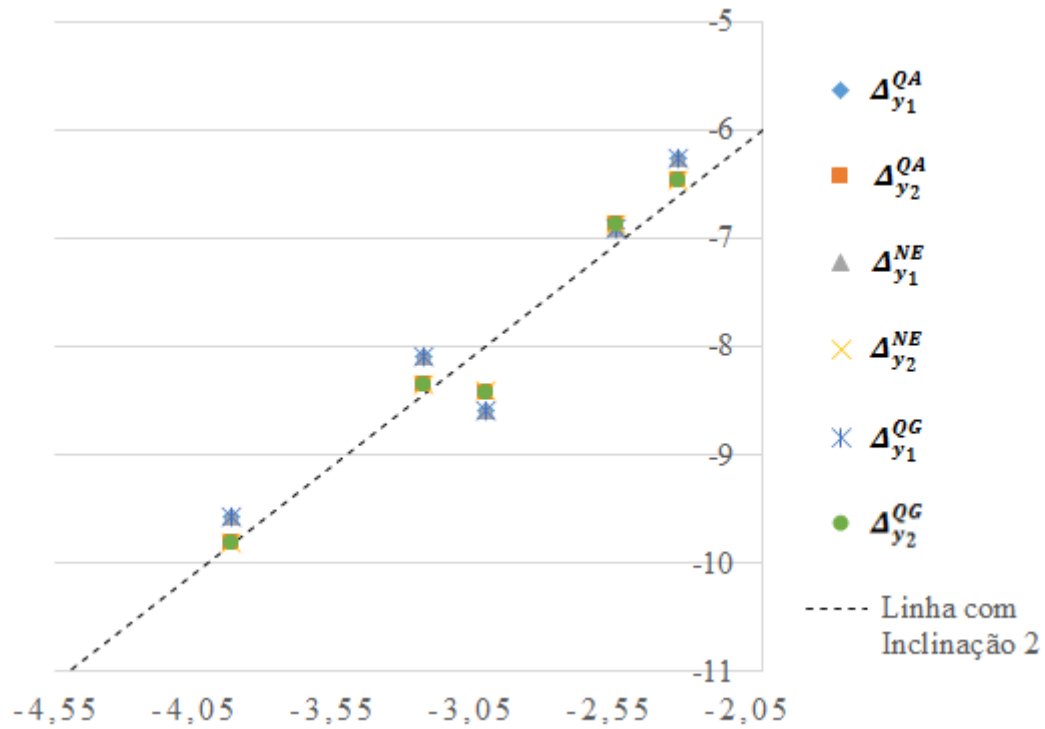


Figura 5.7 Gráfico com o logaritmo do desvio relativo em função do logaritmo do refinamento da malha, para  $\sigma$  igual a 50 e  $\phi$  igual a 0,2.

### 5.1.3 Comparação para a condutividade térmica de cruzeta e círculo com mesmo $\phi$ e mesmo $\sigma$

Analisamos qual geometria resulta em maior condutividade térmica efetiva, se a cruzeta ou o círculo (figura 5.8), para um mesmo valor de  $\phi$  e de  $\sigma$ . Fixaremos  $\phi$  igual a 0,5 e iremos variar  $\sigma$  no intervalo  $\{0,01, 0,03, 0,05, 0,08, 1, 5, 10, 20, 50, 100\}$ . Os resultados estão expostos no gráfico da figura 5.9.

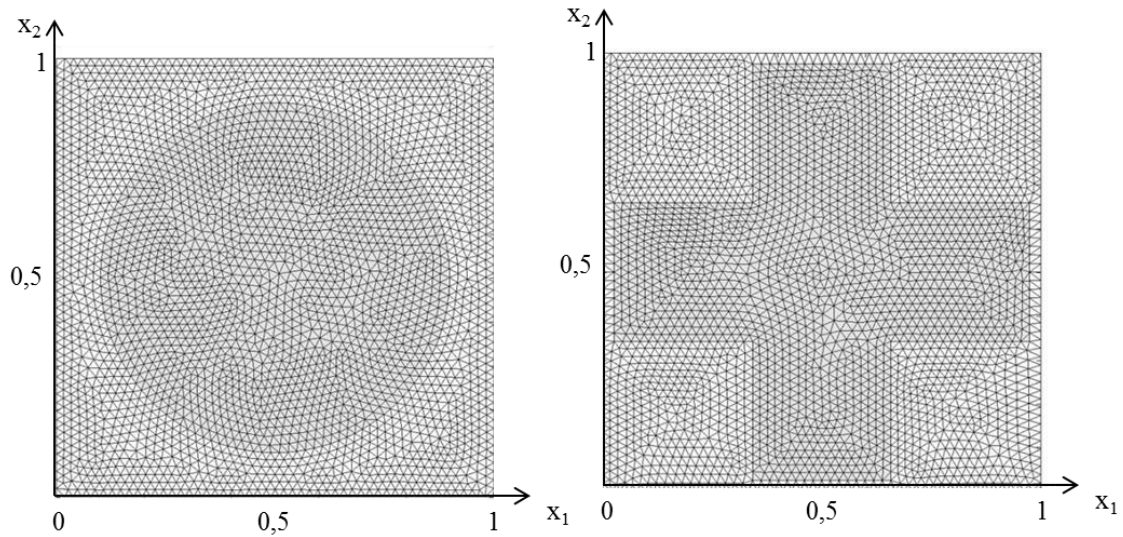


Figura 5.8 Dois arranjos com a mesma relação entre a condutividade dos materiais e a mesma relação entre a quantidade de material descontínuo e quantidade de material total: qual terá a maior condutividade térmica efetiva?

Podemos observar que, para  $\sigma$ 's menores do que 1, o círculo nos fornece uma maior condutividade térmica efetiva. Já para  $\sigma$ 's maiores do que 1, o contrário acontece. Este fenômeno ocorre porque, como frações de material com uma condutividade maior dentro da célula vão fazer com que o calor seja conduzido mais facilmente, frações de material com uma condutividade menor irão causar efeito contrário. Ou seja, como a cruzeta é mais eficiente em aumentar a condução de calor quando  $\sigma > 1$ , a microestrutura em cruzeta também é mais eficiente dificultando a condução de calor quando  $\sigma < 1$ . Esse comportamento está de acordo com o encontrado por (FAN e WANG, 2010).

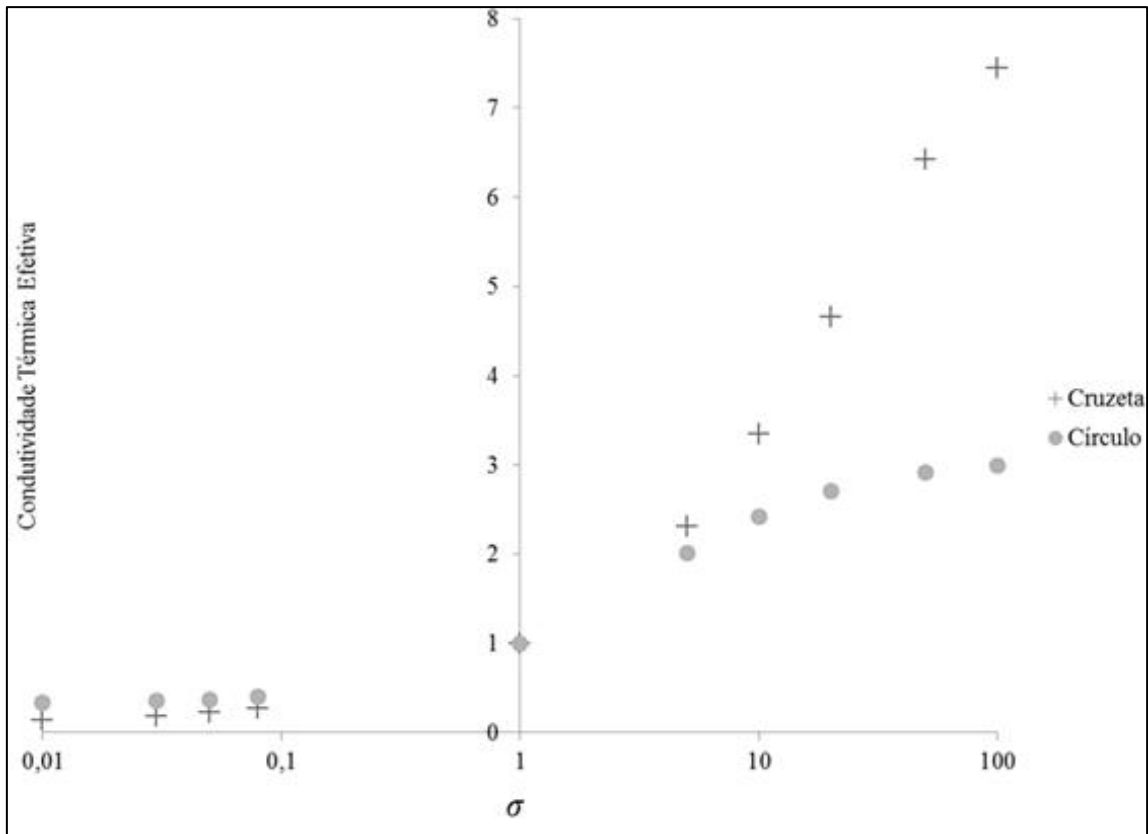


Figura 5.9 Gráfico  $\log(\sigma)$  x condutividade térmica efetiva. Analisamos, para um mesmo  $\phi$  igual a 0,5, a condutividade térmica para diferentes  $\sigma$ 's no intervalo  $\{0,01, 0,03, 0,05, 0,08, 1, 5, 10, 20, 50, 100\}$  para um arranjo geométrico de cruzeta e de círculo.

## 5.2 Resultados – uma análise do ganho da condutividade térmica em função da distribuição de material nos níveis microscópicos

### 5.2.1 O ganho de condutividade térmica

Antes de avaliarmos os resultados, para que possa ser feita uma comparação entre a condutividade térmica efetiva de um meio periódico, heterogêneo e isotrópico com duas escalas e a condutividade térmica efetiva de um meio periódico, heterogêneo e isotrópico, mas com três escalas, definimos o ganho de condutividade térmica efetiva,  $k_{ganho}$ . Para isso, é necessário olharmos com mais atenção para as parametrizações que estamos usando.

No caso de um meio com duas escalas de tamanho, a condutividade efetiva adimensional,  $k_{eff}$ , é função de  $\phi$ , de  $\sigma$ , e da geometria  $G$ , além de poder ser

determinada pela homogeneização convencional (ver figura 4.2). O resultado obtido aplicando o procedimento  $P$ ,  $P_G(\phi, \sigma)$ , está parametrizado por  $k_c$ ,

$$k_{eff,HC}^* = \frac{k_{eff,HC}}{k_c} = P_G(\phi, \sigma). \quad (5.8)$$

Já para um meio de três escalas, com a mesma fase  $d$  dispersa no material  $c$ , a condutividade térmica efetiva adimensional,

$$k_{eff,HR}^* = \frac{k_{eff,HR}}{k_c}. \quad (5.9)$$

também é função de  $\phi$ , de  $\sigma$ , e da geometria da microestrutura em  $Z$ ,  $G_z$ , e em  $Y$ ,  $G_y$  (ver figura 4.3). Para o primeiro problema local, considerando que  $P$  irá ponderar as condutividades  $k_c$  e  $k_d$ , pode-se escrever que

$$k^1 = k_{eff,Z}^* \equiv \frac{k_{eff,Z}}{k_c} = P_{G_z}(\phi_z, \sigma_z) = P_{G_z}(\phi_z, \sigma) \quad (5.10)$$

Para o segundo problema local, podemos pensar em inclusões ou partículas de condutividade  $k_d$  dispersas em uma matriz cuja condutividade térmica é  $k_{eff,Z}$ , e concluir que

$$\frac{\hat{k}}{k_{eff,Z}} = \frac{k_{eff,Y}}{k_{eff,Z}} = P_{G_Y}(\phi_Y, \hat{\sigma}_Y). \quad (5.11)$$

onde o contraste entre as fases agora é

$$\hat{\sigma}_Y \equiv \frac{k_d}{k_{eff,Z}} = \frac{k_d/k_c}{k_{eff,Z}/k_c} = \frac{\sigma}{k_{eff,Z}^*}. \quad (5.12)$$

Como, de fato,  $\hat{k} = k_{eff,Y} = k_{eff,HR}$ , então

$$k_{eff,HR}^* = \frac{k_{eff,HR}}{k_c} = \frac{k_{eff,Y}}{k_c} = \frac{k_{eff,HR}}{k_c} \frac{k_{eff,Z}}{k_{eff,Z}} = P_{G_Z}(\phi_Z, \sigma) P_{G_Y}(\phi_Y, \hat{\sigma}_Y). \quad (5.13)$$

As equações (3.117), (5.8) e (5.13) nos permitem fazer uma comparação que faça sentido fisicamente entre a condutividade térmica efetiva de um meio com duas escalas e um meio com três escalas. Com esse propósito, o ganho de condutividade térmica efetiva é aqui definido como

$$k_{ganho} = \frac{k_{eff,HR}^*(G_Y, G_Z, \phi, \sigma)}{k_{eff,HC}^*(G_Z, \phi, \sigma)} = \frac{P_{G_Z}(\phi_Z, \sigma_Z) P_{G_Y}(\phi_Y, \hat{\sigma}_Y)}{F_G(\phi_Z, \sigma)}. \quad (5.14)$$

Arbitramos que, nos casos em que a geometria da microestrutura é diferente no nível  $Y$  e no nível  $Z$ , usamos a geometria da menor escala para avaliarmos o ganho obtido.

### 5.2.2 Arranjo quadrado de cilindros circulares nos níveis microcópicos $Z$ e $Y$

Traçamos agora gráficos do ganho da condutividade térmica em função da quantidade de material na microescala,  $Z$ . Para tal, analisaremos o caso de um meio com dois níveis microscópicos onde temos, em ambos, um arranjo quadrado ordenado de cilindros circulares (figura 5.10).

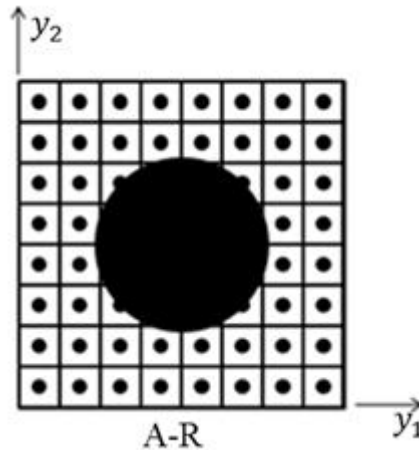


Figura 5.10 Arranjo quadrado de cilindros circulares nos níveis microcópicos  $Z$  e  $Y$

Os resultados foram obtidos para  $\sigma = 2$  (figura 5.11) e para  $\sigma = 50$  (figura 5.12). Observamos que o valor do ganho é sempre superior a um, exceto para  $\phi = 0,7$ , indicando que, para os outros valores de  $\phi$  analisados, é vantajoso retirar material da inclusão da partícula do nível  $Y$  e distribuí-lo nas partículas do nível  $Z$ . Podemos perceber também que, nesses casos, existe um  $\phi_z^{max}$  para o qual o aumento da condutividade térmica é máximo.

Na célula periódica do nível  $Z$  e do nível  $Y$ , (A-C na figura 1.3), existe um limite geométrico e  $\phi$  deve ser menor que 0,78536, de forma que o material  $d$  não ultrapasse os limites do material  $c$ . No caso em que  $\phi = 0,7$ , esse limite está próximo e, portanto, a condutividade térmica efetiva já é alta, pois uma grande fração da célula periódica  $Y$  está ocupada pelo material  $k_d$ , que possui maior condutividade térmica. Assim, retirar material do nível  $Y$  deixa de ser vantajoso.

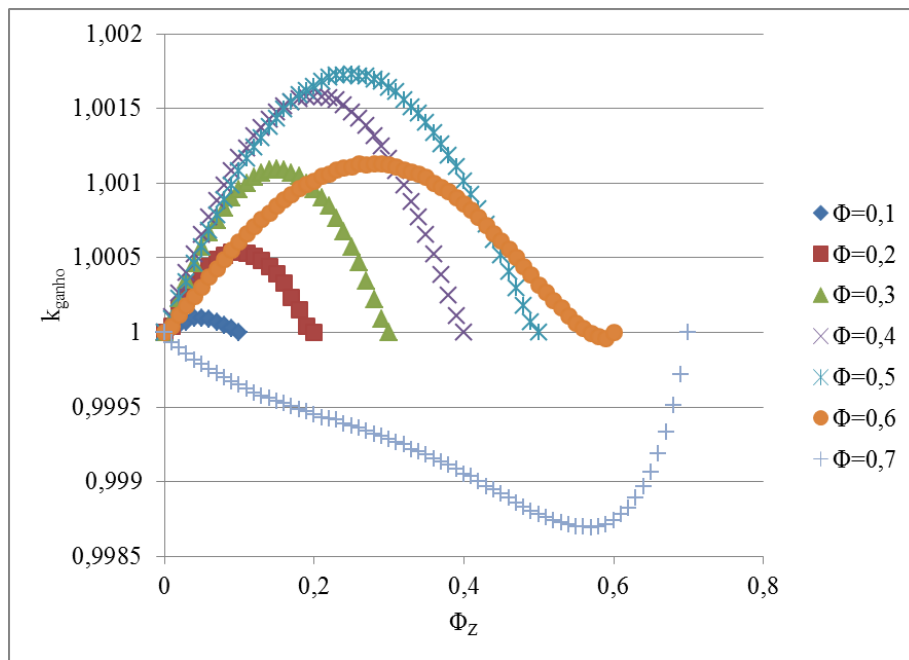


Figura 5.11 Ganho da condutividade térmica efetiva em função da quantidade de material no nível  $Z$  para o arranjo quadrado de cilindros circulares nos níveis microscópicos  $Z$  e  $Y$  para  $\phi = \{0,1, 0,2, 0,3, 0,4, 0,5, 0,6, 0,7\}$ . Foi considerado  $\sigma = 2$ .

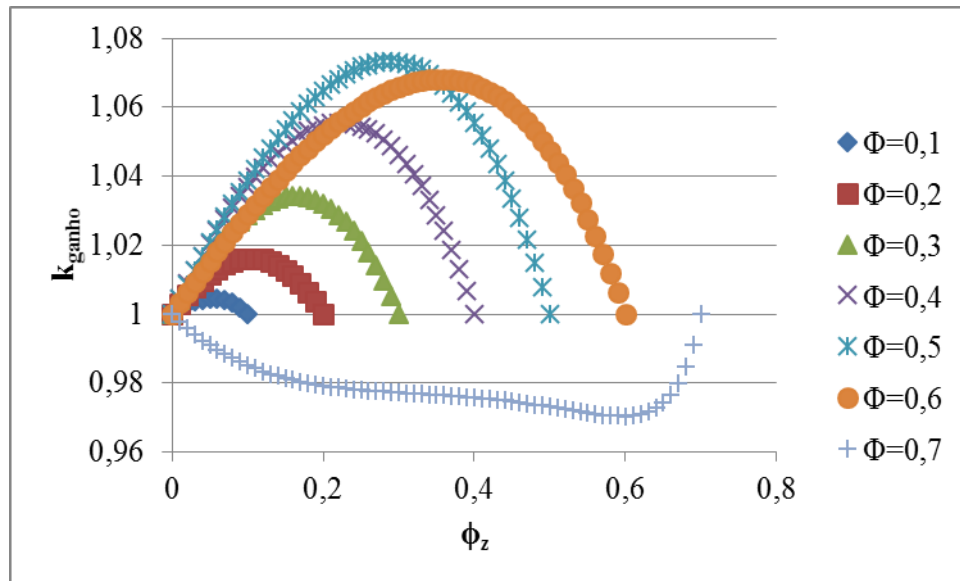


Figura 5.12 Ganho da condutividade térmica efetiva em função da quantidade de material no nível Z para o arranjo quadrado de cilindros circulares nos níveis microscópicos Z e Y para  $\phi = \{0,1, 0,2, 0,3, 0,4, 0,5, 0,6, 0,7\}$ . Foi considerado  $\sigma = 50$ .

### 5.2.3 Arranjo quadrado de cruzetas nos níveis microscópicos Z e Y

Traçamos novamente gráficos do ganho da condutividade térmica em função da quantidade de material na microescala, Z, mas agora temos, no nível Z e no nível Y, um arranjo quadrado ordenado de cruzetas (figura 5.13).

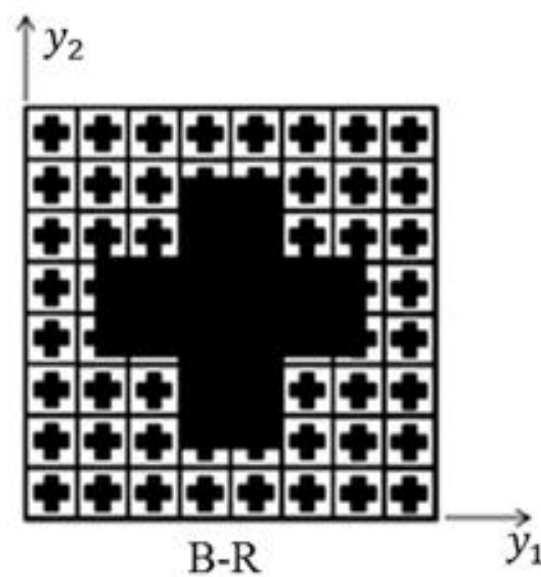


Figura 5.13 Arranjo quadrado de cruzetas nos níveis microscópicos Z e Y



Para a célula periódica com uma cruzeta (B-C na figura 1.3), a do nível  $Z$  e do nível  $Y$ , o limite geométrico é  $\phi$  igual a 0,555. Por isso, a faixa de valores de  $\phi$ 's analisados nesta seção é menor que a anterior.

Observamos na seção 5.1.3 que, quando  $\sigma$  maior que 1, a condutividade térmica efetiva de um arranjo de cruzetas é maior que a de um arranjo de cilindros circulares. Assim, é compreensível por que, quando  $\phi$  está próximo ao limite no caso de arranjos quadrados de cruzetas, tirar material do nível  $Y$  para passar para o nível  $Z$  é ainda pior que para o arranjo quadrado de cilindros circulares.

Obtemos os resultados para  $\sigma = 2$  (figura 5.14) e para  $\sigma = 50$  (figura 5.15).

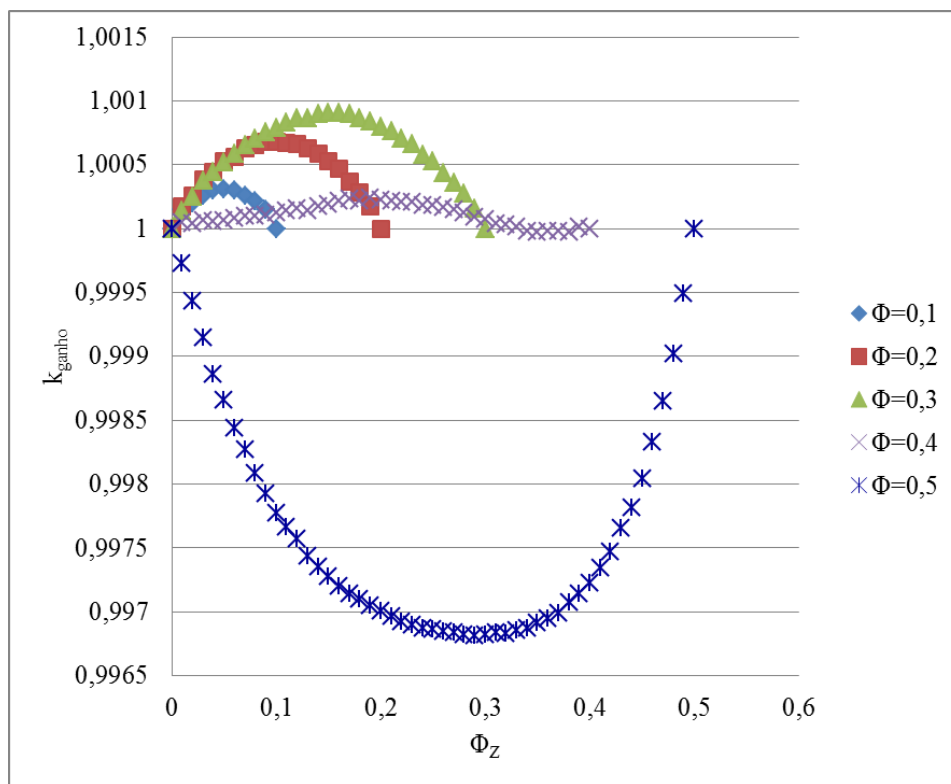


Figura 5.14 Ganho da condutividade térmica efetiva em função da quantidade de material no nível  $Z$  para o arranjo quadrado de cruzetas nos níveis microscópicos  $Z$  e  $Y$  para  $\phi = \{0,1, 0,2, 0,3, 0,4, 0,5\}$ . Foi considerado  $\sigma = 2$ .

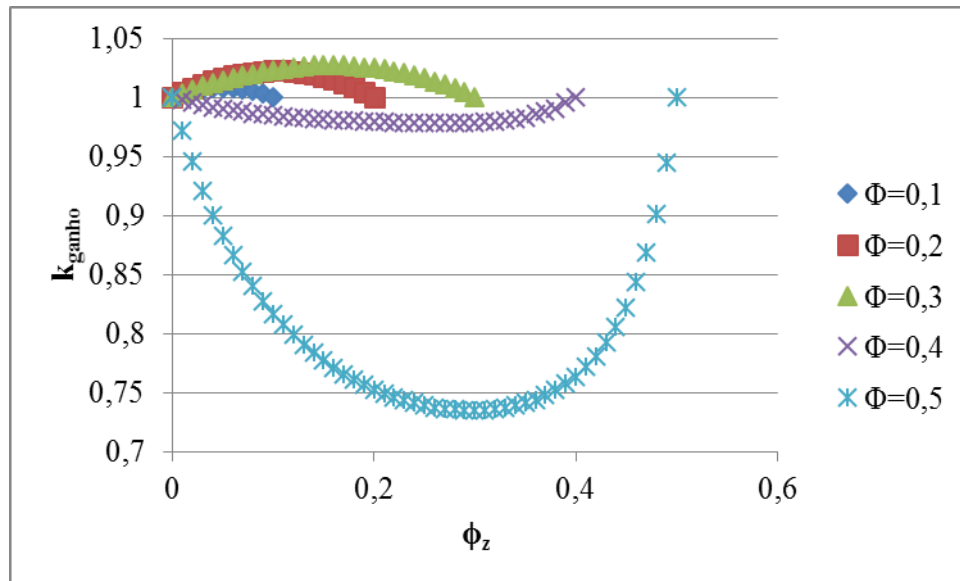


Figura 5.15 Ganho da condutividade térmica efetiva em função da quantidade de material no nível Z para o arranjo quadrado de cruzetas nos níveis microscópicos Z e Y para  $\phi = \{0,1, 0,2, 0,3, 0,4, 0,5\}$ . Foi considerado  $\sigma = 50$ .

#### 5.2.4 Arranjo quadrado de cilindros circulares no nível microscópico Z e arranjo quadrado de cruzetas no nível microscópico Y

Agora, os gráficos do ganho da condutividade térmica em função da quantidade de material na microescala será para o caso em que, no nível Z, há um arranjo quadrado ordenado de cilindros circulares e, no nível Y, um arranjo quadrado ordenado de cruzetas (figura 5.16).

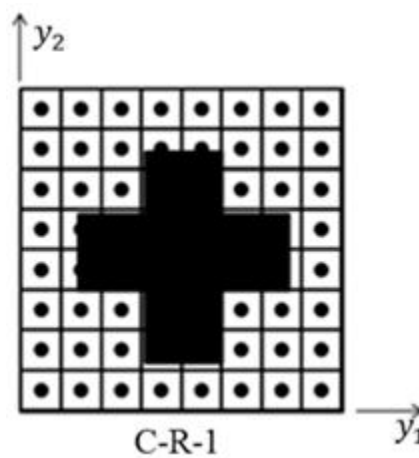


Figura 5.16 Arranjo quadrado de cilindros circulares no nível microscópico Z e arranjo quadrado de cruzetas no nível microscópico Y

Diferentemente dos casos anteriores, agora a geometria da microestrutura em Z não é a mesma geometria da microestrutura em Y. Como definido na seção 5.2.1, o ganho é calculado em função da condutividade térmica se todo o material estivesse distribuído na geometria do nível Z. Por isso, nos gráficos das figuras 5.10 e 5.11, quando percorremos os  $\phi_z$ 's possíveis temos que o ganho é igual a 1 para  $\phi_z$  igual a 0 e igual a 1 para  $\phi_z$  igual a  $\phi$ . Já no gráfico da figura 5.12, o ganho ainda vale 1 quando  $\phi_z$  igual a  $\phi$ , mas tem um valor maior que 1 quando  $\phi_z$  igual a 0, já que a condutividade térmica efetiva de um arranjo de cruzetas é maior que a de um arranjo de cilindros circulares.

Observamos que, quando  $\phi$  igual a 0,6 ou 0,7, ou seja, quando é maior que 0,555, existem alguns casos de  $\phi_z$ 's baixos em que seria necessário alocar no nível Y uma quantidade de material maior que a permitida pelo limite geométrico da célula do arranjo quadrado de cruzetas. Percebemos ainda que, para os arranjos analisados, à exceção de uma pequena faixa de  $\phi_z$ 's quando  $\phi$  igual a 0,7, quase sempre é vantajoso passar material do nível Y para o nível Z.

Novamente, obtemos os resultados para  $\sigma = 2$  (figura 5.17) e para  $\sigma = 50$  (figura 5.18).

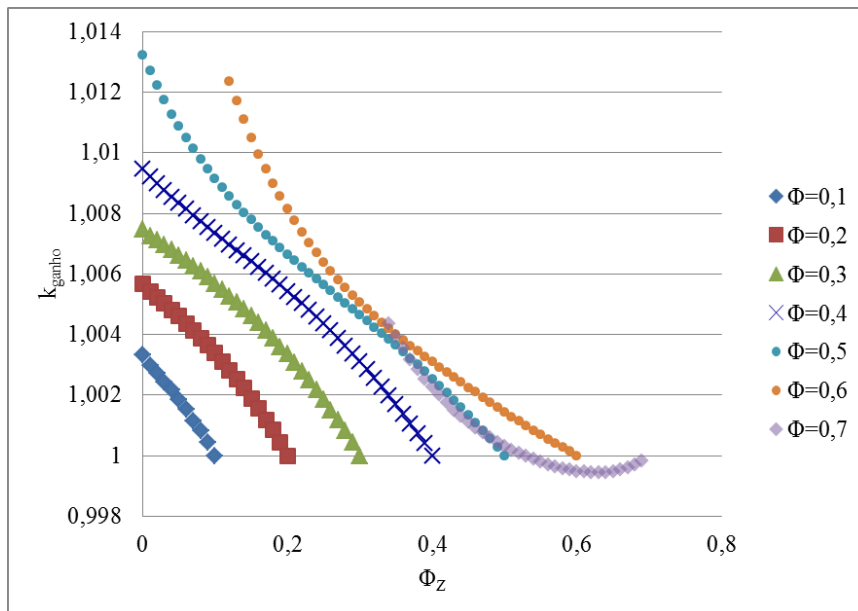


Figura 5.17 Ganho da condutividade térmica efetiva em função da quantidade de material no nível Z para o arranjo quadrado de cilindros circulares no nível microscópico Z e arranjo quadrado de cruzetas no nível microscópico Y para  $\phi = \{0,1, 0,2, 0,3, 0,4, 0,5, 0,6, 0,7\}$ . Foi considerado  $\sigma = 2$ .

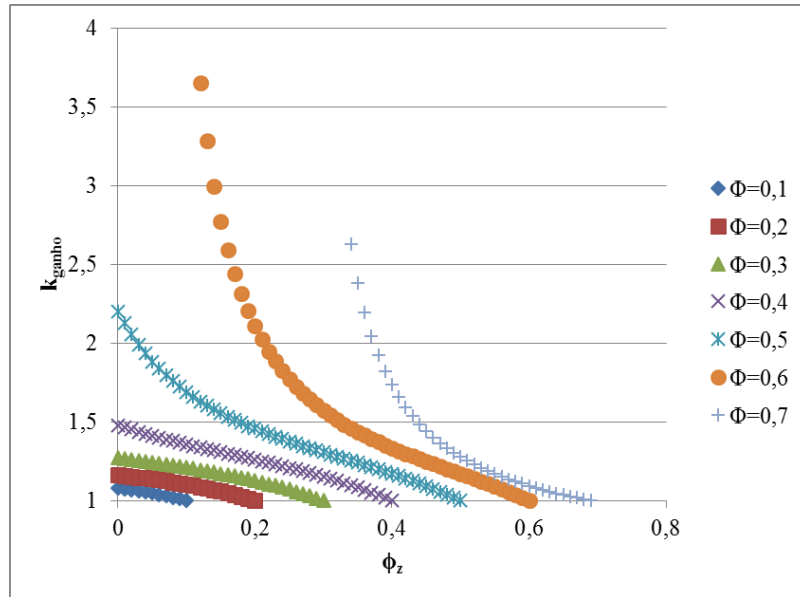


Figura 5.18 Ganho da condutividade térmica efetiva em função da quantidade de material no nível Z para o arranjo quadrado de cilindros circulares no nível microscópico Z e arranjo quadrado de cruzetas no nível microscópico Y para  $\phi = \{0,1, 0,2, 0,3, 0,4, 0,5, 0,6, 0,7\}$ . Foi considerado  $\sigma = 50$ .

#### 5.2.5 Arranjo quadrado de cruzetas no nível microscópico Z e arranjo quadrado de cilindros no nível microscópico Y

Por último, analisaremos o caso em que, no nível Z, há um arranjo quadrado ordenado de cruzetas e, no nível Y, um arranjo quadrado ordenado de cilindros circulares (figura 5.19). O gráfico do ganho da condutividade térmica em função da quantidade de material na microescala, Z está apresentado nas figuras 5.19 ( $\sigma$  igual a 2) e 5.20 ( $\sigma$  igual a 50).

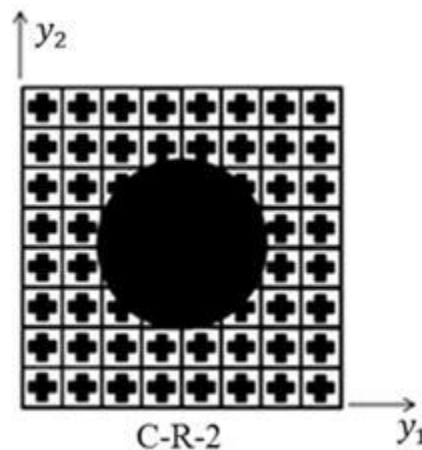


Figura 5.19 Arranjo quadrado de cruzetas no nível microscópico Z e arranjo quadrado de cilindros no nível microscópico Y

Como a geometria da microestrutura em  $Z$  é diferente da microestrutura em  $Y$ , o ganho de condutividade térmica novamente só é igual a um para  $\phi_z$  igual a  $\phi$ . Quando  $\phi_z$  igual a zero, todo o material está em um arranjo quadrado ordenado de cilindros circulares, por isso o ganho é menor que 1, pois é comparado com o arranjo de cruzetas. Novamente, obtemos os resultados para  $\sigma = 2$  (figura 5.20) e para  $\sigma = 50$  (figura 5.21).

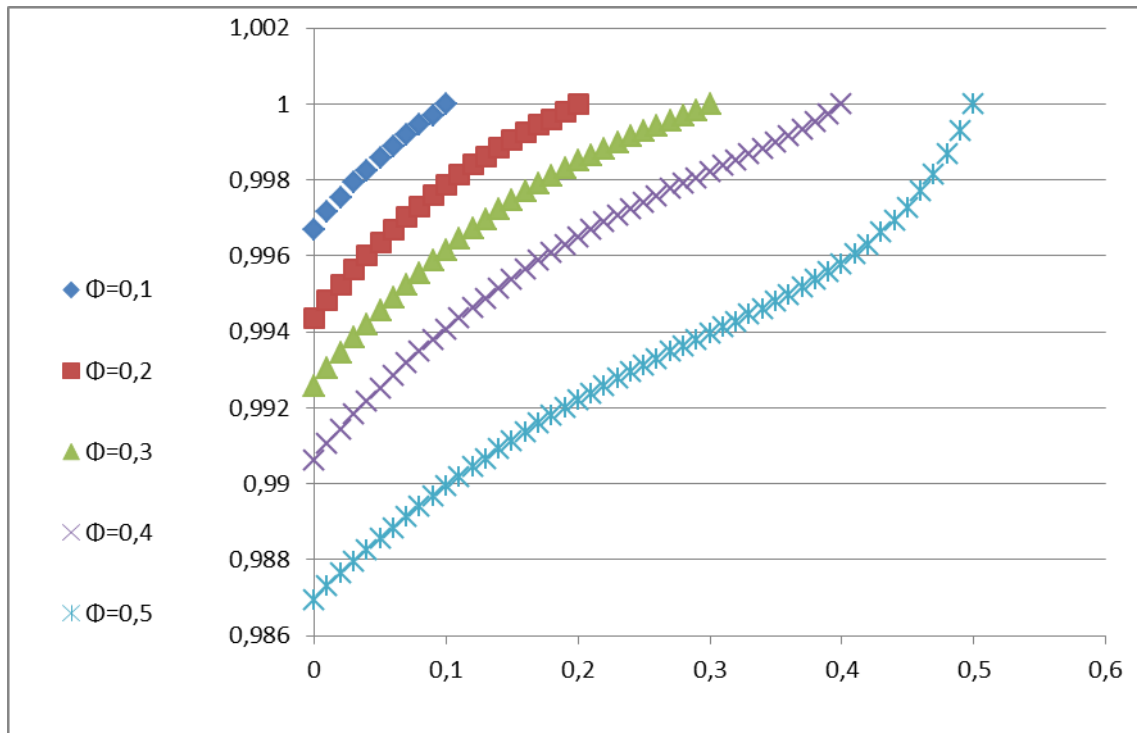


Figura 5.20 Ganho da condutividade térmica efetiva em função da quantidade de material no nível  $Z$  para o arranjo quadrado de cruzetas no nível microscópico  $Z$  e arranjo quadrado de cilindros circulares no nível microscópico  $Y$  para  $\phi = \{0,1, 0,2, 0,3, 0,4, 0,5\}$ . Foi considerado  $\sigma = 2$ .

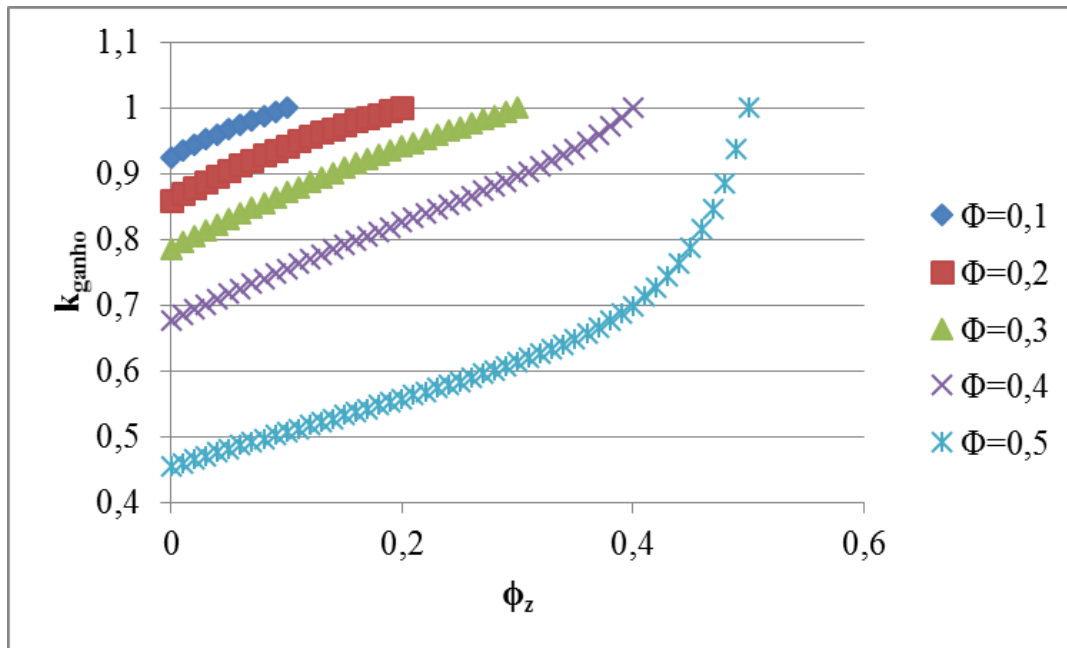


Figura 5.21 Ganho da condutividade térmica efetiva em função da quantidade de material no nível Z para o arranjo quadrado de cruzetas no nível microscópico Z e arranjo quadrado de cilindros circulares no nível microscópico Y para  $\phi = \{0,1, 0,2, 0,3, 0,4, 0,5\}$ . Foi considerado  $\sigma = 50$ .

## 6 CONCLUSÃO

Usamos o cálculo variacional e o método da homogeneização reiterada para abordar o problema físico da condução de calor em um meio compósito com múltiplas escalas e, em seguida, aplicamos o método dos elementos finitos para resolver os problemas de célula, obtendo assim a condutividade térmica efetiva desse meio. A metodologia analítico-numérica desenvolvida nos permitiu estudar com sucesso variadas microestruturas.

A condutividade térmica efetiva pôde ser calculada de maneira eficiente, mesmo com elementos finitos lineares. Para os casos em que as fronteiras entre os materiais na microestrutura eram retas, conseguimos obter o valor da propriedade apenas com o erro da aritmética de ponto flutuante. Já nos casos em que as fronteiras eram curvas, resolvemos o problema usando o método dos elementos finitos em uma malha refinada e conseguimos obter resultados próximos aos disponíveis na literatura.

Em seguida, analisamos meios compósitos heterogêneos isotrópicos com três escalas e, calculando a condutividade térmica efetiva, observamos em quais casos a inclusão de partículas na microestrutura nos levou a ganhos relativos e percebemos que, dentro dessas faixas de  $\phi'_z$ s para um determinado  $\phi$  nas quais o ganho de condutividade térmica efetiva é maior que 1, há um  $\phi_z^{max}$  para o qual esse ganho é máximo.

Como propostas para trabalhos futuros, implementaremos elementos finitos isoparamétricos e trabalharemos com microestruturas tridimensionais. Na figura 6.1, está representado, esquematicamente, um fluido com nanopartículas dispersas – representadas como esferas – se juntando em aglomerados representados por dois ou três cilindros. Apesar das hipóteses simplificadoras que usamos em nosso modelo (como considerar a Lei de Fourier válida em todas as escalas), esperamos encontrar bons resultados que ajudem a entender a condução de calor nesses materiais. Para termos uma boa performance, implementaremos pré-condicionamento no método dos gradientes conjugados, que usamos para resolver os sistemas de equações algébricas lineares. Também implementaremos a resolução do problema proposto através de uma análise isogeométrica (CÔRTEZ, 2013).

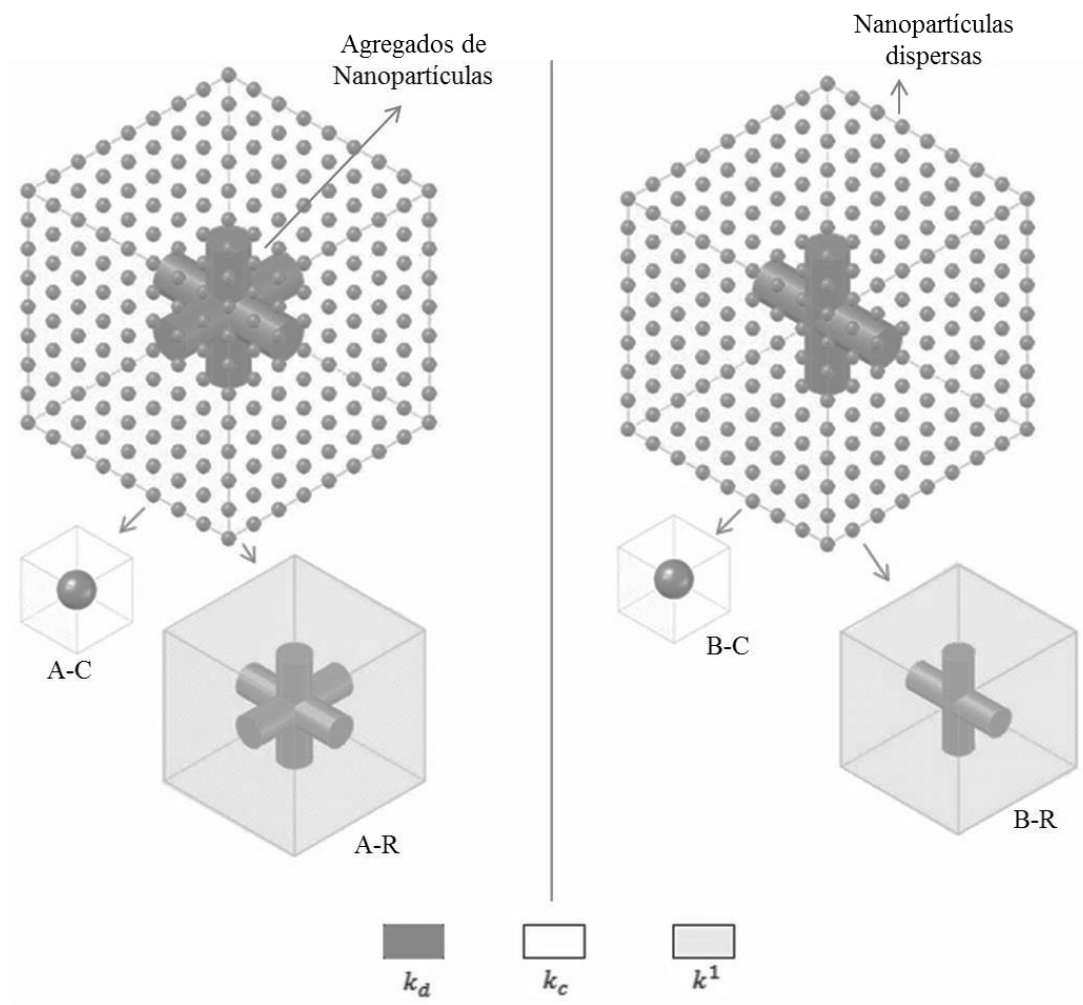


Figura 6.1 Esquema de um modelo tridimensional de nanofluido.



## 7 REFERÊNCIAS

ALLAIRE, G., BRIANE, M. Multiscale Convergence and Reiterated Homogenisation. **Proceedings of the Royal Society of Edinburgh**, v. 126A, p. 297-342, 1996.

ALMQVIST, A. et al. Reiterated homogenization applied in hydrodynamic lubrication. **Journal of Engineering Tribology**, v. 222, n. 7, p. 827-841, Julho 2008.

AURIAULT, J. L. Effective Macroscopic Description For Heat Conduction In Periodic Composites. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 26, p. 861-869, 1983.

AURIAULT, J.-L., ENE, H. I. Macroscopic Modelling of Heat Transfer in Composites with Interfacial Thermal Barrier. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 37, n. 18, p. 2885-2892, Dezembro 1994.

AURIAULT, J.-L., BOUTIN, C., CHRISTIAN, G. **Homogenization of Coupled Phenomena in Heterogenous Media**, Londres: ISTE Ltd, 2009.

BAKHVALOV, N., PANASENKO, G. **Homogenisation: Averaging Processes in Periodic Media**. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, v. 36, 1989.

BATHE, K.-J. **Finite Elements Procedure**. New Jersey: Prentice-Hall, Inc., 1996.

BENSOUSSAN, A., LIONS, J. L., PAPANICOLAOU, G. **Asymptotic Analysis for Periodic Structures**. [S.l.]: North-Holland, 1978.

BOUTAHAR, L., BIKRI, K. E., BENAMAR, R. A homogenization procedure for geometrically non-linear free vibration analysis of functionally graded annular plates with porosities, resting on elastic foundations. **Ain Shams Engineering Journal**, v. 7, p. 313-333, Março 2016.

CAO, L.-Q. Iterated two-scale asymptotic method and numerical algorithm for the elastic structures of composite materials. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 194, n. 27-29, p. 2899–2926, Julho 2005.

CHOPKAR, M. et al. Effect of Particle Size on Thermal Conductivity of Nanofluid. **Metallurgical and Materials Transactions A**, v. 39, n. 7, p. 1535–1542, Julho 2008.

CIORANESCU, D., DONATO, P. **An Introduction to Homogenization**. New York: Oxford University Press, 1999.

CÔRTEZ, A. M. A. **Isogeometric Analysis and Preconditioning Strategies for Divergence-Conforming Spline Discretizations for the Stokes Problem**. Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, Brasil, 2003.

CRUZ, M. E., CASTILLERO, J. B. Weak Formulation of the Heat Conduction Problem in Multiscale Heterogeneous Media with Perfect Interface Contact Using Reiterated Homogenization. **Society for the Advancement of Material and Process Engineering (SAMPE)**, 25 Maio 2016.

DAS, S. K., CHOI, S. U. S. A Review of Heat Transfer in Nanofluids. **Advances in Heat Transfer**, v. 41, p. 81-97, 2009.

DUNN, M. L. et al. Thermal Conductivity of Hybrid Short Fiber Composites. **Journal of Composite Materials**, v. 27, n. 15, p. 1493-1519, Dezzembro 1993.

EVANS, W. et al. Effect of Aggregation And Interfacial Thermal Resistance on Thermal Conductivity of Nanocomposites and Colloidal Nanofluids. **Heat and Mass Transfer**, v. 51, p. 1431-1438, 2008.

FAN, J., WANG, L. Effective thermal conductivity of nanofluids: the effects of microstructure. **Journal of Physics D: Applied Physics, Volume 43, Number 16**, v. 43, Abril 2010.

GU, J.-J., HE, Q.-C. Exact connections between the effective elastic moduli of fibre-reinforced composites with general imperfect interfaces. **International Journal of Solids and Structures**, v. 104-105, p. 65-72, Janeiro 2017.

HONG, K. S., HONG, T. K., YANG, H. S. Thermal Conductivity of Fe Nanofluids Depending on the Cluster Size of Nanoparticles. **Applied Physics Letters**, v. 88, 17 Janeiro 2006.

HUGHES, T. J. R. **The Finite Element Method**. New Jersey: Prentice-Hall. INC., 1987.

JIN, J. S., LEE, J. S. Effects of Aggregated Sphere Distribution and Percolation on Thermal Conduction of Nanofluids. **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, v. 27, p. 173-178, 2013.

KLUSEMANN, B., BÖHM, H. J., SVENDSEN, B. Homogenization methods for multi-phase elastic composites with non-elliptical reinforcements: Comparisons and benchmarks. **European Journal of Mechanics - A/Solids**, v. 34, p. 21-37, Julho-Agosto 2012.

LI, C. H., PETERSON, G. P. The effect of particle size on the effective thermal conductivity of  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$ -water nanofluids. **Journal of Applied Physics**, n. 101, Dezembro 2007.

LI, E. et al. Numerical homogenization for incompressible materials using selective smoothed finite element method. **Composite Structures**, v. 123, p. 216-232, Maio 2015.

LÓPEZ-LÓPEZ, E. et al. Effective permittivity of a fiber-reinforced composite with transversely isotropic constituents. **Journal of Electrostatics**, v. 71, p. 791-800, Agosto 2013.

MACHADO, L. B. **Determinação da Condutividade Térmica Efetiva de Compósitos Fibrosos Unidirecionais Randômicos**. Rio de Janeiro: Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, 2000.

MANTEUFEL, R. D., TODREAS, N. E. Analytic formulae for the effective conductivity of a square or hexagonal array of parallel tubes. **Int. J. Heat Mass Transfer**, v. 37, p. 647-657, 1994.

MATINE, A. et al. Transient heat conduction within periodic heterogeneous media: A space-time homogenization approach. **International Journal of Thermal Sciences**, v. 92, p. 217-229, Junho 2015.

MATT, C. F. T. **Condutividade Térmica Efetiva de Materiais Compósitos com Microestruturas Tridimensionais e Resistência Térmica Interfacial**. Rio de Janeiro: Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, 2003.

MATT, C. F. T., CRUZ, M. E. C. C. Effective Thermal Conductivity of Composite Materials with 3-D Microstructures and Interfacial Thermal Resistance. **Numerical Heat Transfer, Part A: Applications**, 53:6, 01 January 2008. 577-604.

MAXWELL, J. C. **A treatise on electricity and magnetism**. Oxford: Clarendon Press, 1873.

MIRMIRA, S. R. **Effective Thermal Conductivity of Fibrous Composites: Experimental and Analytical Study**. Texas: Ph.D. Thesis. College Station. A&M University, 1999.

NEZAMABADI, S. et al. Compressive failure of composites: A computational homogenization approach. **Composite Structures**, v. 127, p. 60-68, Setembro 2015.

NILSSON, F. et al. Simulating the effective electric conductivity of polymer composites with high aspect ratio fillers. **Composites Science and Technology**, v. 132, p. 16-23, Agosto 2016.

PAHLAVANPOUR, M. et al. Prediction of elastic properties in polymer–clay nanocomposites: Analytical homogenization methods and 3D finite element modeling. **Computational Materials Science**, v. 79, p. 206-215, Novembro 2013.

PERRINS, W. T., MCKENZIE, D. R., MCPHEDRAN, R. C. Transport Properties of Regular Arrays of Cylinders. **Proceedings of the Royal Society of London A**, London, v. 369, p. 207-225, 1979.

PETERSON, G. P., LI, C. H. Heat and Mass Transfer in Fluids with Nanoparticle Suspensions. **Advances in Heat Transfer**, v. 39, p. 257–376, 2006.

PUTMAN, S. A. et al. Thermal Conductivity of Nanoparticle Suspensions. **Journal of Applied Physics**, v. 99, Fevereiro 2006.

RAYLEGH, L. On the instability of cylindrical fluid surfaces. **Philosophical Magazine**, v. 34, p.257-376, 1892.

RODRÍGUEZ, E. I., CRUZ, M. E., BRAVO-CASTILLERO, J. "Reiterated homogenization applied to heat conduction in heterogeneous media with multiple spatial scales and perfect thermal contact between the phases". **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, 2015.

SCHEWCHUK, J. R. **An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain**. Pittsburg: School of Computer Science, Cornegie Mellon University, 1994.

SCHÖBERL, J. An advancing front 2D/3D-mesh generator based on abstract rules. **Computing and Visualization in Science**, p. 41-52, February 1997.

SHI, P., SPAGNUOLO, A., WRIGHT, S. Reiterated Homogenization and the Double-Porosity Model. **Transport in Porous Media**, v. 59, n. 1, p. 73-95, Abril 2005.

STRANG, G. **An Analysis of the Finite Element Method**. Wellesley: Wellesley-Cambridge Press, 1973.

TORQUATO, S. Random heterogeneous media: Microstructure and improved bounds on effective properties. **American Society of Mechanical Engineers**, v. 44, p. 37-76, Fevereiro 1991.

VATANI, A., WOODFIELD, P. L., DAO, D. V. A survey of practical equations for prediction of effective thermal conductivity of spherical-particle nanofluids. **Journal of Molecular Liquids**, v. 211, p. 712–733, Novembro 2015.

VENERUS, D. C. et al. Study of Thermal Transport in Nanoparticle Suspensions Using Forced Rayleigh Scattering. **Journal of Applied Physics**, v. 100, n. 9, Novembro 2006.

WIMMER, J. et al. Computational homogenisation from a 3D finite element model of asphalt concrete—linear elastic computations. **Finite Elements in Analysis and Design**, v. Volume 110, p. 43-57, Março 2016.

ZHANG, X., GU, H., FUJII, M. Experimental Study on the Effective Thermal Conductivity of Nanofluids. **Internation Journal of Thermophysics**, v. 27, p. 569-580, Março 2006.

ZHOU, Q., ZHANG, H. W., ZHENG, Y. G. A homogenization technique for heat transfer in periodic granular materials. **Advanced Powder Technology**, v. 23, p. 104-114, Janeiro 2012.

## APÊNDICE A – ELEMENTOS FINITOS TRIANGULARES LINEARES

Para realizar as análises numéricas desta dissertação, utilizamos elementos finitos triangulares, pois estes apresentam uma série de vantagens em relação a outros elementos finitos, como o fato de serem uma forma geométrica apropriada para a geração de malhas em domínios irregulares (HUGHES, 1987). Como utilizamos um conjunto de interpoladores Lagrangeanos de primeira ordem para discretizar o problema, diz-se que os elementos utilizados são elementos finitos triangulares lineares. Este tipo de elemento será revisado neste Apêndice e, em seguida, construiremos as matrizes de rigidez elementares e os vetores de forças locais (MACHADO, 2000).

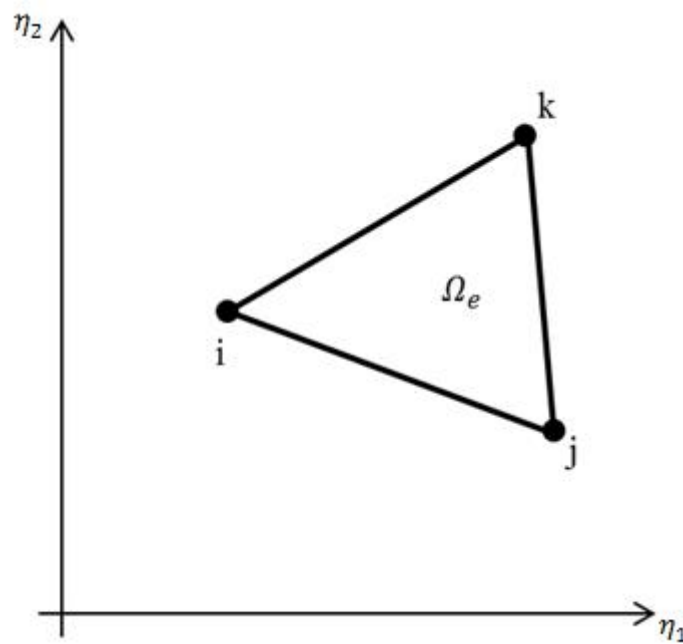


Figura A.1 Elemento triangular  $\Omega^e$

A figura A.1 ilustra um elemento típico  $\Omega^e$ . Os vértices  $v_i = (\eta_1^i, \eta_2^i)$ ,  $i \in \{1,2,3\}$ , são numerados no sentido anti-horário de modo que a área  $A_{el}$ , expressa pelo determinante

$$A_{el} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & \eta_1^1 & \eta_2^1 \\ 1 & \eta_1^2 & \eta_2^2 \\ 1 & \eta_1^3 & \eta_2^3 \end{vmatrix}, \quad (\text{A.1})$$

tenha um valor positivo. As funções de interpolação nodal, ou funções de forma, são dadas por

$$N_i(\boldsymbol{\eta}) = N_i(\eta_1, \eta_2) = \frac{a_i + b_i\eta_1 + c_i\eta_2}{2A_{el}}, \quad (\text{A.2})$$

sendo

$$\begin{aligned} a_i &= \eta_1^j \eta_2^m - \eta_1^m \eta_2^j, \\ b_i &= \eta_2^j - \eta_2^m \equiv \eta_2^{jm}, \\ c_i &= \eta_1^m - \eta_1^j \equiv \eta_1^{mj}, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

$i, j, m = 1, 2, 3$ . Os coeficientes  $a$ ,  $b$  e  $c$  são obtidos através da permutação cíclica dos índices na ordem  $i, j, m$ .

A partir da equação para a matriz global do sistema, equação (4.10), e das funções de forma (A.2), pode-se escrever a matriz de rigidez elementar como

$$A_{ij} = \int_{\Omega_{sc}} \frac{\partial N_i}{\partial \eta_p} \frac{\partial N_j}{\partial \eta_p} d\mathbf{y}. \quad (\text{A.4})$$

O cálculo exato das integrais em (A.4) resulta em

$$\mathbf{A}^e = \begin{bmatrix} b_1b_1 + c_1c_1 & b_1b_2 + c_1c_2 & b_1b_3 + c_1c_3 \\ & b_2b_2 + c_2c_2 & b_2b_3 + c_2c_3 \\ \text{simétrico} & & b_3b_3 + c_3c_3 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

Realizaremos agora a montagem do vetor de forças do sistema. Da equação (4.11) e das funções de forma (A.2), pode-se escrever a matriz de rigidez elementar como



$$f_i = \int_{\Omega_{sc}} \frac{\partial N_i}{\partial \eta_p} d\mathbf{y}. \quad (\text{A.6})$$

O cálculo exato das integrais para o índice  $p$  igual a 1 em (A.6) resulta em

$$\mathbf{f}^e = \begin{bmatrix} \eta_2^2 - \eta_2^3 \\ \eta_2^3 - \eta_2^1 \\ \eta_2^1 - \eta_2^2 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.7})$$

Para  $p$  igual a 2,

$$\mathbf{f}^e = \begin{bmatrix} \eta_1^2 - \eta_1^3 \\ \eta_1^3 - \eta_1^1 \\ \eta_1^1 - \eta_1^2 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.8})$$

## APÊNDICE B – INTEGRAÇÃO DE GAUSS

Queremos avaliar a integral

$$I = \int \int_{|\Omega_e|} F(\eta_1, \eta_2) d\eta_1 d\eta_2. \quad (\text{B.1})$$

Para isso, transformamos o elemento triangular  $\Omega_e$  no elemento triangular padrão  $T$  (figura B.1).

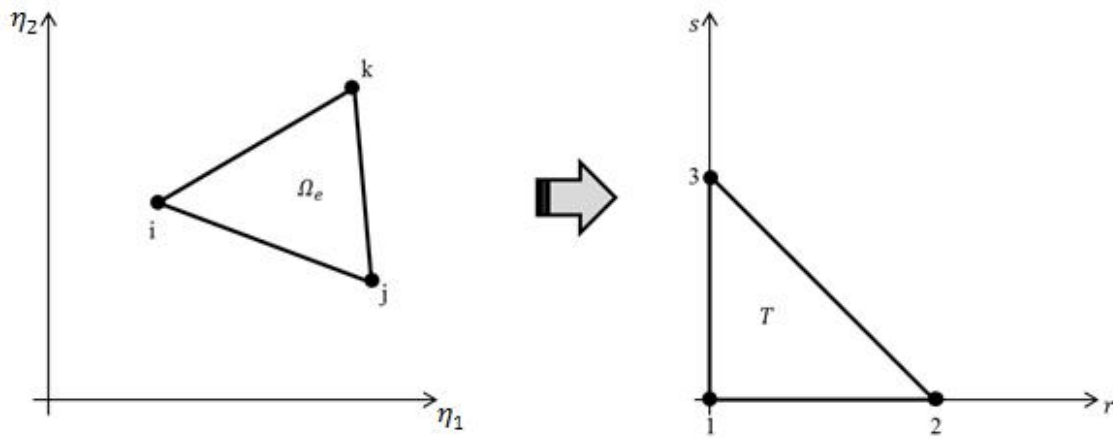


Figura B.1 Transformação do domínio  $(\eta_1, \eta_2)$  para o domínio  $(r, s)$ . Figura adaptada de (BATHE, 1996).

Com isso,

$$\int \int_{|\Omega_e|} F(\eta_1, \eta_2) d\eta_1 d\eta_2 = \int \int_{|\Omega_e|} F(P(r, s), Q(r, s)) |J(r, s)| dr ds. \quad (\text{B.2})$$

Para os elementos triangulares, as funções de forma são (BATHE, 1996)

$$N_1 = 1 - r - s, \quad (\text{B.3})$$

$$N_2 = r, \quad (\text{B.4})$$

$$N_3 = s. \quad (\text{B.5})$$

e as coordenadas dos nós  $\eta_1$  e  $\eta_2$ ,

$$\eta_1^e(r, s) = \eta_{1,1}^e N_1 + \eta_{1,2}^e N_2 + \eta_{1,3}^e N_3, \quad (\text{B.6})$$

$$\eta_2^e(r, s) = \eta_{2,1}^e N_1 + \eta_{2,2}^e N_2 + \eta_{2,3}^e N_3. \quad (\text{B.7})$$

onde  $\eta_{a,b}^e$  significa  $\eta_a^e$  do nó  $b$ . Já o jacobiano  $|J(r, s)|$  pode ser calculado e vale

$$|J(r, s)| = \left| \frac{\partial(\eta_1, \eta_2)}{\partial(r, s)} \right| = \left| \begin{array}{cc} \frac{\partial\eta_1}{\partial r} & \frac{\partial\eta_2}{\partial r} \\ \frac{\partial\eta_1}{\partial s} & \frac{\partial\eta_2}{\partial s} \end{array} \right| = 2|\Omega_e|, \quad (\text{B.8})$$

onde  $|\Omega_e|$  é a área do triângulo  $\Omega_e$ . Com isso, a quadratura gaussiana de grau  $NNG$  para um elemento triangular padrão nos leva a

$$\int \int_{|\Omega_e|} F(\eta_1, \eta_2) d\eta_1 d\eta_2 \cong |\Omega_e| \sum_{i=1}^{NNG} w_i F(P(r_i, s_i), Q(r_i, s_i)). \quad (\text{B.9})$$

Nesta dissertação, usamos 13 pontos de integração para realizar os cálculos da quadratura de Gauss. Os valores para  $w_i$ ,  $r_i$  e  $s_i$  para esse caso estão tabelados em (BATHE, 1996).